NOUVELLE PROTEINE DE FIXATION DU PHOSPHATE, COMPOSITIONS PHARMACEUTIQUES LA CONTENANT ET SES UTILISATIONS

La présente invention a pour objet une nouvelle protéine, issue du sérum humain, de fixation du phosphate, des compositions pharmaceutiques la contenant ainsi que ses utilisations, notamment dans le cadre du traitement de l'hyperphosphatémie et des maladies cardiovasculaires ou de l'arthrite.

Le phosphate est une molécule très importante impliquée dans de nombreux mécanismes biologiques. On retrouve notamment le phosphate dans les phospholipides, dans le mécanisme de production d'énergie (ATP, ADP), dans les processus de signalisation cellulaire, dans la composition du matériel génétique dans les os (sous forme de phosphate de calcium).

L'hyperphosphatémie est une pathologie liée à un excès de phosphate dans l'organisme et provoque notamment une augmentation des risques de maladies cardiovasculaires, en favorisant les processus d'athérosclérose et de calcification des artères (Dorozhkin et Epple, 2002 ; Amann et al., 2003 ; Blazheevich et al., 1975). La calcification s'effectuant au niveau des articulations, l'hyperphosphatémie peut aussi provoquer de l'arthrite (pseudo-goutte).

Les sels de phosphate de calcium produits dans le sérum lors d'une hyperphosphatémie précipitent dans les tissus mous avec calcification ectopique dans différents tissus : vaisseaux (accidents vasculaires cérébraux ou cardiaques), articulations (pseudo-goutte), cristallin, interstitium rénal (néphrocalcinose), sous-cutanées (prurit), pulmonaires, pancréatiques.

Ainsi, la moitié des décès chez les personnes souffrant d'insuffisance rénale est due à des maladies cardiovasculaires liées à l'hyperphosphatémie. A cet égard, certains chélateurs du phosphate qui complexent le phosphate dans la lumière intestinale sont actuellement utilisés comme médicament. Cependant, tous ces chélateurs ne sont pas physiologiques. De là découlent certaines complications ou restrictions quant à leur usage.

Les préparations contenant du magnésium sont limitées par la survenue de troubles digestifs (diarrhée) et sont à proscrire en raison du risque d'hypermagnésémie. De même, la prescription d'hydroxyde d'aluminium, longtemps utilisé du fait de son efficacité, doit être évitée, ou du moins limitée à de très faibles périodes, en raison du

risque d'intoxication aluminique (anémie hypochrome microcytaire, ostéomalacie, myopathie, démence).

La prescription de sels de calcium est le meilleur moyen pour corriger à la fois l'hypocalcémie et l'hyperphosphorémie, permettant d'une part d'augmenter la quantité de calcium absorbée par l'intestin grêle malgré le déficit en calcitriol, et d'autre part de complexer le phosphore dans la lumière intestinale sous forme de phosphate de calcium qui sera éliminé dans les selles. Cependant, l'inconvénient majeur des chélateurs contenant du calcium est d'induire une hypercalcémie, qui, dans certaines séries, a pu être notée chez 20% des malades. Ce risque a conduit à mettre au point d'autres produits capables de limiter l'hyperphosphorémie.

Le médicament actuellement le plus utilisé est le Renagel® (Ramsdell ; 1999). Il s'agit d'un polymère cationique, non absorbable capable de chélater le phosphate.

La présente invention a pour but de fournir un nouveau chélateur protéique physiologique se liant au phosphate, ne nécessitant pas l'emploi d'autres ions qui peuvent entraîner des complications et offrant de plus larges perspectives d'utilisation que les chélateurs actuels.

La présente invention concerne une protéine caractérisée en ce qu'elle comprend ou est constituée par :

- la séquence SEQ ID NO : 1,
- ou toute séquence dérivée de la séquence SEQ ID NO : 1, notamment par substitution, suppression ou addition d'un ou plusieurs acides aminés, sous réserve que ladite séquence dérivée se lie au phosphate,
- ou toute séquence homologue de la séquence SEQ ID NO : 1, ayant de préférence une homologie d'au moins environ 80% avec la séquence SEQ ID NO : 1, sous réserve que ladite séquence homologue se lie au phosphate,
- ou tout fragment d'une des séquences définies ci-dessus, sous réserve que ledit fragment se lie au phosphate, notamment tout fragment étant constitué d'au moins environ 20 acides aminés contigus dans la séquence SEQ ID NO : 1.

La présente invention concerne une protéine telle que définie ci-dessus, caractérisée en ce qu'elle comprend ou est constituée par :

- la séquence SEQ ID NO : 2 ou la séquence SEQ ID NO : 3,
- ou toute séquence dérivée de la séquence SEQ ID NO : 2 ou SEQ ID NO : 3, notamment par substitution, suppression ou addition d'un ou plusieurs acides aminés, sous réserve que ladite séquence dérivée se lie au phosphate,

– ou toute séquence homologue de la séquence SEQ ID NO : 2 ou SEQ ID NO : 3, ayant de préférence une homologie d'au moins environ 80% avec la séquence SEQ ID NO : 2 ou SEQ ID NO : 3, sous réserve que ladite séquence homologue se lie au phosphate,

– ou tout fragment d'une des séquences définies ci-dessus, sous réserve que ledit fragment se lie au phosphate, notamment tout fragment étant constitué d'au moins environ 20 acides aminés contigus dans la séquence SEQ ID NO : 2 ou SEQ ID NO : 3.

La séquence SEQ ID NO : 2 correspond à la protéine humaine de fixation du phosphate. Cette nouvelle protéine a été isolée dans le plasma humain et sa structure tridimensionnelle montre qu'elle appartient à la classe des "phosphate binding protein" (protéines de fixation du phosphate : PBP). Elle est également appelée par la suite HPBP (protéine humaine de fixation du phosphate).

La séquence SEQ ID NO : 3 correspond à une protéine homologue de la protéine de séquence SEQ ID NO : 2, présentant un pourcentage d'identité d'environ 90% avec la séquence SEQ ID NO : 2, et ayant les mêmes propriétés de fixation du phosphate que la séquence SEQ ID NO : 2.

La propriété de fixation du phosphate des séquences de l'invention peut être vérifiée par le test suivant de fixation du phosphate par marquage radioactif :

La protéine est fixée sur une membrane de nitrocellulose (dot blot par aspiration). On laisse incuber la membrane dans un tampon radioactif (^{32}P (10 mCi/ml, Amersham-Biosciences) 2M ; Tris 50 mM ; pH 8,0)

La membrane est rapidement rincée 2 × 1 min dans un tampon Tris 50 mM, pH 8,0. En exposant un film photographique avec la membrane (environ 45 min) on peut détecter les zones qui fixent le phosphate radioactif (voir Figure 3 ci-après).

La présente invention concerne également une séquence nucléotidique codant pour une protéine telle que définie ci-dessus.

La présente invention concerne également un vecteur recombinant, notamment plasmide, cosmide, phage ou ADN de virus, contenant une séquence nucléotidique telle que définie ci-dessus.

Selon un mode de réalisation avantageux, la présente invention concerne un vecteur recombinant tel que défini ci-dessus, contenant les éléments nécessaires à l'expression dans une cellule hôte des polypeptides codés par la séquence nucléotidique telle que définie ci-dessus, insérée dans ledit vecteur.

La présente invention concerne également une cellule hôte, choisie notamment parmi les bactéries, les virus, les levures, les champignons, les plantes ou les cellules de mammifères, ladite cellule hôte étant transformée, notamment à l'aide d'un vecteur recombinant tel que défini ci-dessus.

La présente invention concerne également une composition pharmaceutique comprenant à titre de substance active une protéine telle que définie ci-dessus, notamment SEQ ID NO : 2 ou SEQ ID NO : 3, en association avec un véhicule pharmaceutiquement acceptable.

La présente invention concerne également une composition pharmaceutique telle que définie ci-dessus, dans laquelle la protéine de l'invention, notamment SEQ ID NO : 2 ou SEQ ID NO : 3, est en association avec un variant de la protéine paraoxonase, ayant une activité d'hydrolyse du paraoxon.

Parmi les variants de la paraoxonase, on peut citer les variants PON1, PON2, PON3, d'origine humaine ou non, tels que SEQ ID NO : 4 (PON1 humaine ; Hassett et al., 1991), SEQ ID NO : 5 (PON2 humaine ; Primo-Parmo et al., 1996), SEQ ID NO : 6 (PON3 humaine ; Reddy et al., 2001), SEQ ID NO : 7 (PON1 de lapin ; Hassett et al., 1991), SEQ ID NO : 8 (PON1 de rat ; Rodrigo et al., 1997), SEQ ID NO : 9 (PON1 de souris ; Sorenson et al., 1995), SEQ ID NO : 10 (PON2 de souris ; Primo-Parmo et al., 1996) et SEQ ID NO : 11 (PON3 de souris ; Primo-Parmo et al., 1996).

La présente invention concerne également l'utilisation d'une protéine telle que définie ci-dessus, notamment SEQ ID NO : 2 ou SEQ ID NO : 3, pour la préparation d'un médicament destiné à la prévention ou au traitement de maladies liées à une hyperphosphatémie, telles que les maladies cardiovasculaires et l'arthrite (pseudo-goutte).

Le terme "hyperphosphatémie" désigne un excès de phosphate dans l'organisme. Plus exactement, l'hyperphosphatémie est définie par une augmentation de la concentration plasmatique de phosphate au dessus de 1,44 mmol/l (45 mg/l), ladite quantité étant obtenue par dosage du phosphate total (le dosage par méthode colorimétrique est effectué après un procédé de minéralisation).

Selon un mode de réalisation avantageux, la protéine de l'invention pourra être administrée sous forme intraveineuse pour pouvoir fixer une quantité maximale de phosphate pendant une longue période, de l'ordre de la semaine. En éliminant ultérieurement la protéine, une grande quantité de phosphate sera ainsi éliminée rapidement. Ceci permet d'espacer et diminuer les temps de dialyse.

La présente invention concerne plus particulièrement l'utilisation d'une protéine telle que définie ci-dessus, notamment SEQ ID NO : 2 ou SEQ ID NO : 3, dans le cadre de la prévention ou du traitement des maladies cardiovasculaires.

La présente invention concerne également l'utilisation d'une protéine selon l'invention, notamment de la protéine représentée par la séquence SEQ ID NO : 2 ou SEQ ID NO : 3, en association avec une protéine telle qu'un variant de la protéine paraoxonase, dans le cadre de la prophylaxie ou du traitement des intoxications provoquées par des insecticides ou des agents neurotoxiques, tels que le soman, le VX, le tabun ou le sarin, ou dans le cadre du traitement de l'athérosclérose.

La présente invention concerne également un produit de combinaison comprenant au moins une protéine telle que définie ci-dessus, notamment SEQ ID NO : 2 ou SEQ ID NO : 3, et au moins un variant de la protéine paraoxonase, pour une utilisation simultanée, séparée ou étalée dans le temps destiné à la prophylaxie ou au traitement des intoxications provoquées par des insecticides ou des agents neurotoxiques, tels que le soman, le VX, le tabun ou le sarin.

L'utilisation combinée de la protéine de l'invention, notamment SEQ ID NO : 2, avec un variant de la protéine paraoxonase, permet d'accroître la stabilité de la paraoxonase, notamment dans le cadre de la prophylaxie ou du traitement des intoxications provoquées par des insecticides ou des agents neurotoxiques.

La présente invention concerne également une méthode de dosage de la protéine telle que définie ci-dessus, caractérisée en ce qu'elle comprend les étapes suivantes :

– des anticorps monoclonaux de lapin dirigé contre différents épitopes de la protéine de l'invention (anti-HPB) sont fixés sur une plaque et le sérum humain à analyser contenant ladite protéine (HPB) est déposé sur la plaque susmentionnée,

– la plaque est rincée et lavée,

– on dépose sur la plaque des anticorps anti-anticorps de lapin (anti-IGrabbit-per) marqués avec de la peroxydase durant 30 minutes, afin de former un complexe ternaire entre un anticorps monoclonal de lapin, la protéine selon l'invention et un anticorps anti-anticorps de lapin susmentionnés (anti-HPB – HPB – anti-IGrabbit-per),

– la plaque est rincée et lavée,

– on fait réagir la peroxydase fixée sur la plaque avec son substrat (kit disponible en commerce, Chemiluminescent Peroxidase Substrate (Sigma)) et la réaction est arrêtée au bout de 30 minutes avec la 3,3',5,5'-tétraméthylbenzidine (TMB, Sigma),

– la densité optique du produit formé à l'étape précédente est mesurée à 450 nm à l'aide d'un spectrophotomètre, et la comparaison de cette mesure avec une courbe étalon permet de déterminer la concentration de la protéine selon l'invention (HPB) présente dans le sérum.

Ainsi, la méthode de dosage susmentionnée utilise une méthode par immunodosage du type ELISA (Engvall et al., 1971).

D'autres méthodes peuvent être utilisées pour doser la concentration de la protéine de l'invention dans le plasma telles que :

– les méthodes électrophorétiques, ou
– la quantification de son activité.

La présente invention concerne également l'application de la méthode de dosage telle que définie ci-dessus

au diagnostic *in vitro* de maladies liées à une hyperphosphatémie notamment lorsque la quantité de protéine telle que définie ci-dessus, notamment SEQ ID NO : 2 ou SEQ ID NO : 3, dosée selon la méthode telle que définie ci-dessus, est inférieure à la quantité de cette protéine normalement présente dans le sang d'un individu sain, ou

au diagnostic *in vitro* de maladies liées à une hypophosphatémie notamment lorsque la quantité de protéine telle que définie ci-dessus, notamment SEQ ID NO : 2 ou SEQ ID NO : 3, dosée selon la méthode telle que définie ci-dessus, est supérieure à la quantité de cette protéine normalement présente dans le sang d'un individu sain, ou

au diagnostic *in vitro* d'une prédisposition d'un individu à de telles pathologies.

Le taux de la protéine selon l'invention est un indicateur de prédisposition à un risque de maladie cardiovasculaire. Ainsi, les personnes ayant un taux faible de ladite protéine auront un taux plus important de phosphate libre qui précipitera avec le calcium du plasma pour former des plaques de phosphate de calcium, ce qui est un facteur aggravant notamment les risques de maladies cardiovasculaires ou d'arthrite.

Un taux anormal de cette protéine est aussi le signe d'une pathologie existante. Par exemple une hyperphosphatémie peut déclencher une production accrue de protéine dans le but de limiter le taux de phosphate. Un taux faible peut être lui aussi révélateur d'un dysfonctionnement.

La présente invention concerne également l'application telle que définie ci-dessus au diagnostic *in vitro* de maladies liées à une hyperphosphatémie telles que les maladies cardiovasculaires, notamment les maladies cardiovasculaires liées à la formation de

plaques d'athéromes, ou au diagnostic *in vitro* d'une prédisposition d'un individu au développement d'une des maladies susmentionnées.

La présente invention concerne également l'application telle que définie ci-dessus au diagnostic *in vitro* de maladies liées à une hypophosphatémie, ou au diagnostic *in vitro* d'une prédisposition d'un individu au développement de ces maladies.

Parmi les signes cliniques ou physiologiques caractérisant les maladies liées à une hypophosphatémie, on peut citer :

- une déminéralisation des os,
- les manifestations musculaires de l'hypophosphatémie qui comportent une myopathie proximale affectant le muscle squelettique et une dysphagie et un iléus affectant les muscles lisses,
- des carences cardiopulmonaires par le manque d'ATP, et
- une encéphalopathie métabolique.

LEGENDES DES FIGURES

La Figure 1 représente un gel SDS-PAGE des fractions finales dans le cadre de la purification de la paraoxonase humaine et de la protéine de l'invention SEQ ID NO : 2.

La colonne A correspond au marqueur de poids moléculaire et les colonnes B, C et D à trois purifications différentes issues de différentes poches de plasma humain. Elles contiennent toutes les trois la paraoxonase humaine et la protéine de fixation du phosphate.

La Figure 2 représente la structure schématique de la protéine de l'invention SEQ ID NO : 2 à laquelle est fixée une molécule de phosphate.

La Figure 3 correspond à un test de fixation du phosphate par la protéine de l'invention SEQ ID NO : 2.

Les colonnes A à F correspondent à différents lots de purification de la protéine de l'invention provenant de différentes poches de plasma humain ; la colonne G au lysozyme 1 mg/ml et la colonne H à la β-lacto globuline.

La Figure 4 représente un gel bidimensionnel d'électrophorèse du mélange de la protéine de l'invention SEQ ID NO : 2 et de la paraoxonase.

La Figure 5 représente les coordonnées moléculaires de la protéine cristallisée de l'invention SEQ ID NO : 2.

PARTIE EXPÉRIMENTALE

Isolation de la protéine

La protéine SEQ ID NO : 2 est obtenue à partir du plasma humain selon le procédé de Gan et *al.* (1991) suivant :

La protéine SEQ ID NO : 2 est purifiée à partir de poches de plasma congelé (~200 ml) fournies par l'Etablissement de Transfusion Sanguine de Lyon-Beynost. Le caillot de fibrine, formé par l'ajout de 1 M (1% v/v) de $CaCl_2$ au plasma est séparé du sérum par filtration. Le sérum est alors mélangé à 400 ml de Gel d'affinité (Cibacron 3GA-Agarose, C-1535, Sigma) équilibré avec un tampon A (Tris/HCl 50 mM, $CaCl_2$ 1mM, NaCl 4M, pH 8). Dans ces conditions, principalement les HDL ("high density lipoprotein" : lipoprotéines de haute densité) sont adsorbées. Après 6 à 8 heures d'incubation, les protéines non adsorbées sur le gel sont éliminées par filtration sur fritté de porosité n°2. Ce lavage s'effectue jusqu'à ce que l'on ne détecte plus de protéine dans l'éluat (absorption UV à 280 nm). Le gel est ensuite équilibré avec un tampon B (Tris/HCl 50 mM, $CaCl_2$ 1mM, pH 8) puis placé en colonne XK 50/30 (Pharmacia). L'élution est réalisée en rajoutant 1g/l de déoxycholate de sodium et 0,1% de triton X-100 au tampon B. Les fractions montrant une activité arylestérase sont injectées sur 50 ml d'un gel échangeur d'anions (DEAE Sepharose Fast Flow, Pharmacia) disposé en colonne XK 26/70 (Pharmacia) et équilibré avec le tampon B et 0,05% de triton X-100. L'élution se fait par gradient de NaCl. Un premier palier est réalisé à 87,5 mM de NaCl afin d'éliminer l'apo A-I, une protéine liée à la paraoxonase, et la majorité des protéines contaminantes. La paraoxonase humaine (PON1) est environ éluée à la concentration de 140 mM de NaCl. Toutes les fractions conservées montrent une activité paraoxonase et arylestérase, ces activités étant vérifiées selon les tests mentionnés plus loin. Les fractions éluées ne sont pas regroupées. Les gels SDS-PAGE des fractions obtenues montrent des bandes comprises entre 38 kDa et 45 kDa (voir Figure 1). Chaque purification n'apporte pas toujours la même distribution de masse apparente. Cette légère hétérogénéité peut s'expliquer par la présence de 2 chaînes glycosylées sur la PON1.

En plus de la PON1 dans ces lots une autre protéine a été isolée par cristallisation, en substituant le triton par le C12-maltoside et en utilisant le sulfate d'ammonium comme agent précipitant. Les cristaux obtenus sont ceux d'une protéine inconnue caractérisée par radiocristallographie et correspondant à la séquence SEQ ID NO : 2 de

l'invention. La cristallisation est actuellement le seul procédé existant pour purifier cette protéine.

L'activité paraoxonase est mesurée dans un tampon Glycine 50 mM/NaOH, $CaCl_2$ 1 mM, en présence de 1 M NaCl, pH 10,5 et est déterminée au moyen d'un spectrophotomètre à double faisceau (Shimadzu UV 160A) thermostaté à 25°C. La vitesse d'hydrolyse est déterminée d'après la variation d'absorbance à 412 nm, correspondant à la formation de p-nitrophénol libéré par l'hydrolyse de paraoxon, en fonction du temps, $\varepsilon = 18290\ M^{-1}cm^{-1}$ (Smolen, 1991).

L'activité arylestérase est mesurée dans un tampon tris 50mM/HCl, $CaCl_2$ 1mM, pH 8 et est déterminée au moyen d'un spectrophotomètre à double faisceau (Shimadzu UV 160A) thermostaté à 25°C. La vitesse d'hydrolyse est déterminée d'après la variation d'absorbance à 270 nm, correspondant à la formation de phénol libéré par l'hydrolyse de phényl acétate, en fonction du temps, $\varepsilon = 1310\ M^{-1}cm^{-1}$ (Smolen, 1991).

Structure

La structure de la protéine cristallisée SEQ ID NO : 2 a été obtenue par cristallographie des rayons X. La structure à 1,9 Å de résolution a été obtenue par la méthode SIRAS (Single Isomorphous Replacement and Anomalous Scattering)(Figure 2).

Les données de diffraction des rayons X ont été collectées sur la ligne BM30 de l'ESRF (Grenoble).

Un dérivé de sel d'atome lourd a été obtenu en trempant un cristal dans une solution contenant des sels d'uranium.

Les images ont été intégrées, mises à l'échelle et combinées avec les programmes XDS2000 (Kabsch, 1993) et la suite CCP4 (COLLABORATIVE COMPUTATIONAL PROJECT, NUMBER 4. 1994. "The CCP4 Suite: Programs for Protein Crystallography". Acta Cryst. D50, 760-763).

Les programmes CNS (BRUNGER, 1998) et SnB (Weeks, 1999) ont été utilisés pour localiser les atomes d'uranium. Le programme SHARP (Copyright © 2001-2002 the Buster Development Group) a été utilisé pour obtenir les phases par la technique SIRAS.

372 acides aminés ont été construits automatiquement dans la carte de densité électronique par le programme ARP/wARP (Perrakis, 1997). Ce premier modèle a ensuite été affiné par le programme CNS.

En raison de la très bonne qualité des cartes de densité électronique, la séquence primaire de la protéine a pu être assignée avec 80% de fiabilité. Une molécule de phosphate a aussi pu être localisée.

La structure obtenue ne correspond pas du tout à la paraoxonase humaine. Le séquençage obtenu en identifiant les acides aminés à partir de la densité électronique indique que ni cette protéine humaine ni son gène n'ont été décrits auparavant. Il s'agit donc d'une nouvelle protéine.

La structure de la protéine de l'invention montre une très forte homologie avec la protéine de fixation du phosphate ("phosphate binding") d'*Escherichia coli*. Cette protéine chez cette bactérie sert à transporter le phosphate à travers le périplasme. On la retrouve chez beaucoup de procaryotes mais chez aucun eucaryote.

La densité électronique a aussi montré qu'une molécule de phosphate était fixée à la nouvelle protéine de l'invention, de la même façon que dans celle d'*Escherichia coli*.

Ainsi, on peut conclure que la protéine de l'invention caractérisée à partir du plasma humain présente une très forte homologie avec la protéine bactérienne et qu'elle est capable de fixer le phosphate et de le transporter.

Séquençage

Digestion dans le gel

Le mélange paraoxonase-HPBP a été séparé par gel électrophorétique avec SDS-PAGE (sans chauffage). Plusieurs bandes correspondant à HPBP aux alentour de 70 kDa ont été découpées.

La digestion de la protéine contenue dans ces bandes a été effectuée grâce au système automatique de digestion, MassPrep Sation (Waters Manchester, G.B.). Les bandes de gel ont été lavées deux fois avec 50 µl d'une solution à 25 mM de carbonate d'ammonium hydrogéné (NH_4HCO_3) et 50 µl d'acétonitrile. Les cystéines ont été réduites avec 50 µl d'une solution à 10mM de dithiothréitol à 57°C et acylé avec 50 µl de iodocacétamide à 55 mM. Après déshydratation avec l'acétonitrile, la protéine a été digérée enzymatiquement avec 10 µl de trypsine porcine modifiée à 12,5 ng/µl (Promega, Madisson, WI, U.S.A) ou bien avec lys-C de Lysobacter enzymogenes (Roche Applied Science, Penzberg, Germany) dans 25 mM de NH_4HCO_3. La digestion s'est opérée une nuit complète à température ambiante. Les peptides clivés ont été extraits avec une solution à 60% d'acétonitrile et 5% d'acide formique.

Analyse par spectrométrie de masse

MALDI-MS et MALDI-MS/MS

Les mesures de masse par MALDI-TOF on été effectuées sur un Ultraflex™ TOF/TOF (Bruker, Daltonik GmbH, Brème, Allemagne). Cet instrument a été utilisé avec un potentiel d'accélération maximum de 25 KV dans le mode reflectron. L'échantillon a été préparé avec la préparation standard de la goutte asséchée sur la cible en acier inoxydable en utilisant comme matrice l'acide α-cyano-4-hydroxycinnamique.

La calibration externe du spectre MALDI-MS a été effectuée en utilisant seulement les pics des charges mono isotopiques d'une solution connue de peptides (bradykinine 1-7 (m/z=757,400), angiotensine humaine II (m/z=1046,542), angiotensine humaine I (m/z=1296,685), substance P (m/z=1347,735), bombesine (m/z=1619,822), renine (m/z=1758,933), ACTH 1-17 (m/z=2093,087) et ACTH 18-39 (m/z=2465,199)). Les masses des peptides mono isotopiques ont été automatiquement annotées grâce au programme Flexanalysis 2.0.

Les spectres MS/MS ont été obtenus par l'analyse des ions métastables obtenus par "Laser-Induced Decomposition" (LID) d'un précurseur ioniques sectionné, sans collision additionnelle en phase gazeuse. Le précurseur ionique a été accéléré à 8kV et a été sélectionné grâce à une trappe à ions à sélection temporelle. Les fragments ont été par la suite accélérés à 19 kV dans la cellule LIFT et leurs masses mesurées après leurs passages sur le réflecteur ionique.

Le séquençage *de novo* de chacun de ces spectres MS/MS a été effectué avec le programme Full DeNovo Sequencing program (Biotools, Bruker Daltonik GmbH, Brème, Allemagne).

NanoLC-MS/MS

L'analyse NanoLC-MS/MS a été effectuée en utilisant un CapLC (Waters, Manchester, G.B.) couplé à un spectromètre de masse "temps de vol" accéléré par un quadripôle hybride orthogonal Q-TOF II ((Micromass, Manchester, G.B.). La séparation par chromatographie en phase inverse à été effectuée avec des capillaires (Pepmap C18, 75 µm i.d., 15 cm de long, LC Packings) sous un flux à 200 nL/min, maintenu constant grâce à une pré-colonne de partage. La calibration a été effectuée en utilisant 2pmol/µl de GFP.

L'acquisition des données de masse a été pilotée par le programme MassLynx (Micromass, Manchester, G.B.) qui bascule automatiquement entre le mode MS et le mode MS/MS.

Les spectres MS/MS générés ont été individuellement séquencés *de novo* afin d'obtenir la séquence partielle ou complète. Ces interprétations ont été réalisées en utilisant le programme PepSeq (MassLynx, Micromass) et le programme PEAKS Studio (Bioinformatics Solutions, Waterloo, Canada) qui sont capables de traiter complètement un fichier .pkl avec un séquençage *de novo* automatique sur chaque spectre MS/MS.

Fixation du phosphate

La fixation du phosphate par la protéine de l'invention SEQ ID NO : 2 a été mise en évidence selon le test suivant :

On dépose 200 µl de la protéine de l'invention SEQ ID NO : 2 (colonnes A-F de la Figure 3), ou du lysozyme 1 mg/ml (colonne G) ou de la βlacto-globuline sur nitrocellulose (dot blot par aspiration).

L'ensemble est incubé pendant 2 h 30 dans un mélange comprenant : tris 50 mM ; pH 8,0 ; ^{32}P (10 mCi/ml) 2 mM.

On effectue ensuite un rinçage 2 fois pendant 1 minute avec du tris 50 mM à pH 8,0, puis on expose l'ensemble à température ambiante pendant 45 minutes.

On constate alors (voir Figure 3) que la protéine de l'invention a fixé le phosphate radioactif (colonnes A à F), alors que les témoins tests ne l'ont pas fixée (colonnes G et H).

Rôle et utilisation de la protéine SEQ ID NO : 2

Pour doser la concentration de cette protéine dans le plasma les méthodes utilisables sont :

- les methodes électrophorétiques,
- la purification de la protéine,
- la quantification de son activité,
- l'immunodosage de la protéine en utilisant des anticorps polyclonaux/monoclonaux dirigé contre la protéine.

Association avec la paraoxonase

Electrophorèse bidimensionnelle

Les protéines purifiées (40 µg) comme dans le protocole décrit précédemment sont mélangées à 100 µL d'une solution contenant 9,8 M d'urée, 4% (v/v) triton X100, 2 mM tributyl phosphine, 0,2 % (v/v) d'ampholine 3-10 (Bio-Lytes 3 -10 ; Bio-Rad), et 0,001% (m/v) de bleu de bromophénol. Des bandelettes (IPG-Strips ; Bio-Rad) de gel de polyacrylamide (T : 4 % ; C : 3 %) prêtes à l'emploi sont utilisées. Des ampholines ont été fixées de manière covalente au polyacrylamide de sorte d'avoir un gradient linéaire de pH pré-établi. Le gradient de pH utilisé est entre 3,0 et 10,0.

1. Isoélectrofocation (IEF)

Les bandelettes sont placées en contact avec les échantillons protéiques dans l'appareil Protean IEF Cell (Bio-Rad) et réhydratées activement (50 V constant) pendant 15 heures à 20°C. L'isoélectrofocalisation est ensuite réalisée en 3 étapes à 20°C. Premièrement un faible voltage de 250 V est appliqué pendant 15 minutes ; deuxièmement, une montée en gradient de 250 à 4000 V (ampérage limité par bandelette à 50 µA) est programmée sur 2 h. Troisièmement, le voltage est maintenu constant à 4000 V pendant 4 heures. Après migration, les bandelettes sont conservées à -20 °C.

D'après le protocole de purification précédent, la protéine HPBP de l'invention est co-purifiée avec la paraoxonase humaine (PON)(Fokine et al., 2003). En faisant un gel bidimensionnel avec le protocole ci-dessus, 2 spots ont été identifiés par séquençage N-terminal comme étant respectivement la protéine de l'invention HPBP et la paraoxonase humaine (voir Figure 4). Les deux protéines ont approximativement la même masse moléculaire (environ 40 kDa) et des points isoélectriques distincts, 6.9-8.5 pour HPBP et 4-5 pour la PON1. En tenant compte du fait qu'il a fallu utiliser des conditions drastiques pour réussir à séparer sur gel les 2 protéines (9M d'urée et 4% de triton)et que les 2 protéines qui ont des points isoélectriques très différents restent co-purifiées après le passage dans une colonne échangeuse d'anion (DEAE sepharose), on conclut qu'elles sont associées en formant un complexe.

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- Amann K., Tornig J., Kugel B., Gross M.L., Tyralla K., El-Shakmak A., Szabo A., Ritz E. (2003) *Kidney Int.* **63**(4): 1296-1301 ;
- Blazheevich N.V., Spirichev V.B., Pozdniakov A.L. (1975) *Kardiologiia.* **15**(6): 67-71 ;
- Brunger A.T., Adams P.D., Clore G.M., Delano W.L., Gros P., Grosse-Kunstleve R.W., Jiang J.-S., Kuszewski J., Nilges N., Pannu N.S., Read R.J., Rice L.M., Simonson T. et Warren G.L. (1998) *Acta Cryst.* **D54**: 905-921 ;
- Dorozhkin S.V., Epple M. (2002) *Angew Chem Int Ed Engl.* **41**(17): 3130-46 ;
- Engvall E., Jonsson K., Perlmann P. (1971) *Biochim Biophys Acta.* (1971) **251**: 427-34 ;
- Fokine A., Morales R., Contreras-Martel C., Carpentier P., Renault F., Rochu D., Chabriere E. (2003) *Acta Crystallogr D.* **59,** 2083-7 ;
- Gan, K.N., Smolen, A., Eckerson, H.W. & La Du, B.N. (1991). *Drug Metab Dispos.* **19**, 100-106 ;
- Hassett, C., Richter, R.J., Humbert, R., Chapline, C., Crabb, J.W., Omiecinski, C.J. et Furlong, C.E. (1991) *Biochemistry* **30**(42), 10141-10149 ;
- Kabsch W. (1993) *J. Appl. Cryst.* **26**: 795-800 ;
- Perrakis, A., Sixma, T. K., Wilson, K.S., et Lamzin, V. S. (1997) *Acta Cryst.* **D53**: 448–455 ;
- Primo-Parmo, S.L., Sorenson, R.C., Teiber, J. et La Du, B.N. (1996) *Genomics* **33**(3), 498-507 ;
- Ramsdell R. (1999) *Anna J.* **26**(3): 346-7 ;
- Reddy, S.T., Wadleigh, D.J., Grijalva, V., Ng, C., Hama, S., Gangopadhyay, A., Khorsan, R., Shih, D., Lusis, A.J., Navab, M. et Fogelman,A.M. (2001) *Arterioscler Thromb Vasc Biol* **21**(4) : 542-7 ;
- Rodrigo, L., Gil, F., Hernandez, A.F., Marina, A., Vazquez, J. et Pla, A. (1997) *Biochem. J.* **321**, 595-601 ;
- Smolen A, Eckerson HW, Gan KN, Hailat N, La Du BN. (1991) *Drug Metab Dispos.*, **19**: 107-112 ;
- Sorenson, R.C., Primo-Parmo, S.L., Kuo, C.L., Adkins, S., Lockridge, O. et La Du, B.N. (1995) *Proc. Natl. Acad. Sci.* U.S.A. **92**(16), 7187-7191 ;
- Weeks, C.M. & Miller, R. (1999) *J. Appl. Cryst.* **32**, 120-124.

REVENDICATIONS

1. Protéine caractérisée en ce qu'elle comprend ou est constituée par :

– la séquence SEQ ID NO : 1,

– ou toute séquence dérivée de la séquence SEQ ID NO : 1, notamment par substitution, suppression ou addition d'un ou plusieurs acides aminés, sous réserve que ladite séquence dérivée se lie au phosphate,

– ou toute séquence homologue de la séquence SEQ ID NO : 1, ayant de préférence une homologie d'au moins environ 80% avec la séquence SEQ ID NO : 1, sous réserve que ladite séquence homologue se lie au phosphate,

– ou tout fragment d'une des séquences définies ci-dessus, sous réserve que ledit fragment se lie au phosphate, notamment tout fragment étant constitué d'au moins environ 20 acides aminés contigus dans la séquence SEQ ID NO : 1.

2. Protéine selon la revendication 1, caractérisée en ce qu'elle comprend ou est constituée par :

– la séquence SEQ ID NO : 2 ou SEQ ID NO : 3,

– ou toute séquence dérivée de la séquence SEQ ID NO : 2 ou SEQ ID NO : 3, notamment par substitution, suppression ou addition d'un ou plusieurs acides aminés, sous réserve que ladite séquence dérivée se lie au phosphate,

– ou toute séquence homologue de la séquence SEQ ID NO : 2 ou SEQ ID NO : 3, ayant de préférence une homologie d'au moins environ 80% avec la séquence SEQ ID NO : 2 ou SEQ ID NO : 3, sous réserve que ladite séquence homologue se lie au phosphate,

– ou tout fragment d'une des séquences définies ci-dessus, sous réserve que ledit fragment se lie au phosphate, notamment tout fragment étant constitué d'au moins environ 20 acides aminés contigus dans la séquence SEQ ID NO : 2 ou SEQ ID NO : 3.

3. Séquence nucléotidique codant pour une protéine telle que définie dans la revendication 1 ou 2.

4. Vecteur recombinant, notamment plasmide, cosmide, phage ou ADN de virus, contenant une séquence nucléotidique selon la revendication 3.

5. Vecteur recombinant selon la revendication 4, contenant les éléments nécessaires à l'expression dans une cellule hôte des polypeptides codés par une séquence nucléotidique selon la revendication 3, insérés dans ledit vecteur.

6. Cellule hôte, choisie notamment parmi les bactéries, les levures, les cellules de champignons, les cellules de plantes ou les cellules de mammifères, ladite cellule hôte étant transformée à l'aide d'un vecteur recombinant selon l'une des revendications 4 ou 5.

7. Composition pharmaceutique comprenant à titre de substance active une protéine selon la revendication 1 ou 2, en association avec un véhicule pharmaceutiquement acceptable.

8. Composition pharmaceutique selon la revendication 7, comprenant à titre de substance active une protéine représentée par la séquence SEQ ID NO : 2 ou SEQ ID NO : 3.

9. Composition pharmaceutique selon la revendication 8, dans laquelle la protéine telle que définie dans la revendication 1 ou 2, notamment SEQ ID NO : 2 ou SEQ ID NO : 3, est en association avec un variant de la protéine paraoxonase, notamment SEQ ID NO : 4, SEQ ID NO : 5, SEQ ID NO : 6, SEQ ID NO : 7, SEQ ID NO : 8, SEQ ID NO : 9, SEQ ID NO : 10 ou SEQ ID NO : 11.

10. Utilisation d'une protéine selon la revendication 1 ou 2, notamment de la protéine représentée par la séquence SEQ ID NO : 2 ou SEQ ID NO : 3, pour la préparation d'un médicament destiné à la prévention ou au traitement de l'arthrite ou de maladies liées à une hyperphosphatémie, telles que les maladies cardiovasculaires, ou, en association avec un variant de la protéine paraoxonase, notamment SEQ ID NO : 4, SEQ ID NO : 5, SEQ ID NO : 6, SEQ ID NO : 7, SEQ ID NO : 8, SEQ ID NO : 9, SEQ ID NO : 10 ou SEQ ID NO : 11, dans le cadre de la prophylaxie ou du traitement des intoxications provoquées par des insecticides ou des agents neurotoxiques tels que le soman, le VX, le sarin ou le tabun, ou dans le cadre du traitement de l'athérosclérose.

11. Produit de combinaison comprenant au moins une protéine selon la revendication 1 ou 2, notamment SEQ ID NO : 2 ou SEQ ID NO : 3, et au moins un variant de la protéine paraoxonase, notamment SEQ ID NO : 4, SEQ ID NO : 5, SEQ ID NO : 6, SEQ ID NO : 7, SEQ ID NO : 8, SEQ ID NO : 9, SEQ ID NO : 10 ou SEQ ID NO : 11, pour une utilisation simultanée, séparée ou étalée dans le temps destiné à la prophylaxie ou au traitement des intoxications provoquées par des insecticides ou des agents neurotoxiques tels que le soman, le VX, le sarin ou le tabun.

12. Méthode de dosage de la protéine selon la revendication 1 ou 2, notamment SEQ ID NO : 2 ou SEQ ID NO : 3, caractérisée en ce qu'elle comprend les étapes suivantes :

– des anticorps monoclonaux de lapin dirigé contre différents épitopes de la protéine selon la revendication 1 ou 2, notamment SEQ ID NO : 2 ou SEQ ID NO : 3, sont fixés sur une plaque et le sérum humain à analyser contenant ladite protéine est déposé sur la plaque susmentionnée,

– la plaque est rincée et lavée,

– on dépose sur ladite plaque des anticorps anti-anticorps de lapin marqués avec de la peroxydase durant 30 minutes, afin de former un complexe ternaire entre un anticorps monoclonal de lapin, ladite protéine et un anticorps anti-anticorps de lapin susmentionnés,

– la plaque est rincée et lavée,

– on fait réagir la peroxydase fixée sur la plaque avec son substrat et la réaction est arrêtée au bout de 30 minutes avec la 3,3',5,5'-tétraméthylbenzidine,

– la densité optique du produit formé à l'étape précédente est mesurée à 450 nm à l'aide d'un spectrophotomètre, et la comparaison de cette mesure avec une courbe étalon permet de déterminer la concentration de la protéine selon la revendication 1 ou 2, notamment SEQ ID NO : 2 ou SEQ ID NO : 3, présente dans le sérum.

13. Application de la méthode de dosage selon la revendication 12

au diagnostic *in vitro* de maladies liées à une hyperphosphatémie notamment lorsque la quantité de protéine selon la revendication 1 ou 2, notamment SEQ ID NO : 2 ou SEQ ID NO : 3, dosée selon la méthode de la revendication 12, est inférieure à la quantité de cette protéine normalement présente dans le sang d'un individu sain, ou

au diagnostic *in vitro* de maladies liées à une hypophosphatémie notamment lorsque la quantité de protéine selon la revendication 1 ou 2, notamment SEQ ID NO : 2 ou SEQ ID NO : 3, dosée selon la méthode de la revendication 12, est supérieure à la quantité de cette protéine normalement présente dans le sang d'un individu sain, ou

au diagnostic *in vitro* d'une prédisposition d'un individu à de telles pathologies.

14. Application selon la revendication 13 au diagnostic *in vitro* de maladies liées à une hyperphosphatémie telles que les maladies cardiovasculaires, notamment les maladies cardiovasculaires liées à la formation de plaques d'athéromes, ou au diagnostic *in vitro* d'une prédisposition d'un individu au développement d'une des maladies susmentionnées.

15. Application selon la revendication 14 au diagnostic *in vitro* de maladies liées à une hypophosphatémie, ou au diagnostic *in vitro* d'une prédisposition d'un individu au développement de ces maladies.

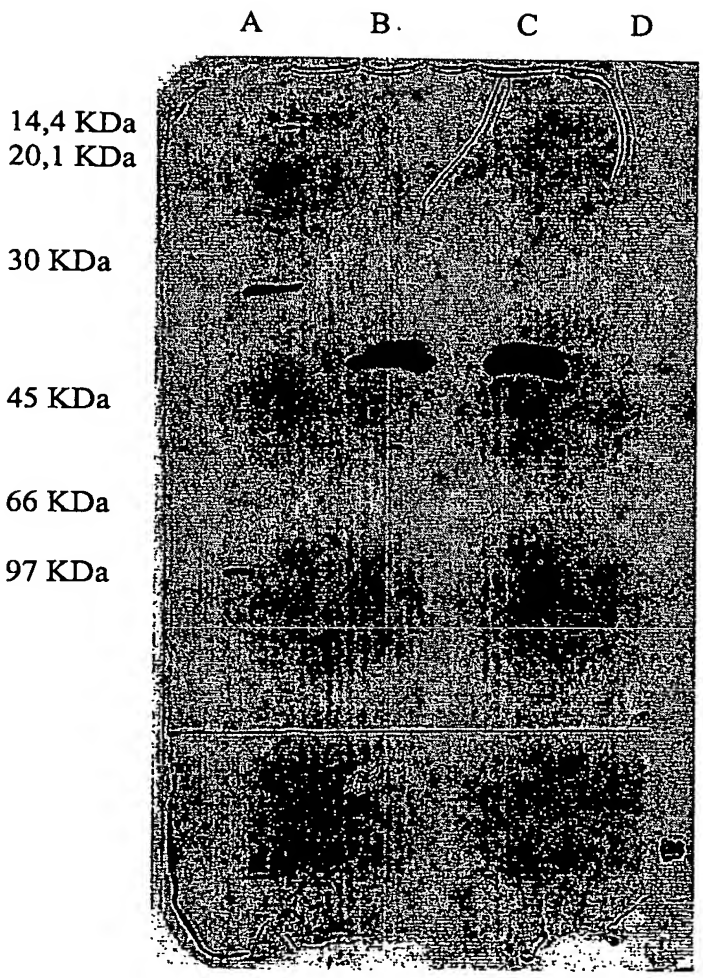

FIGURE 1

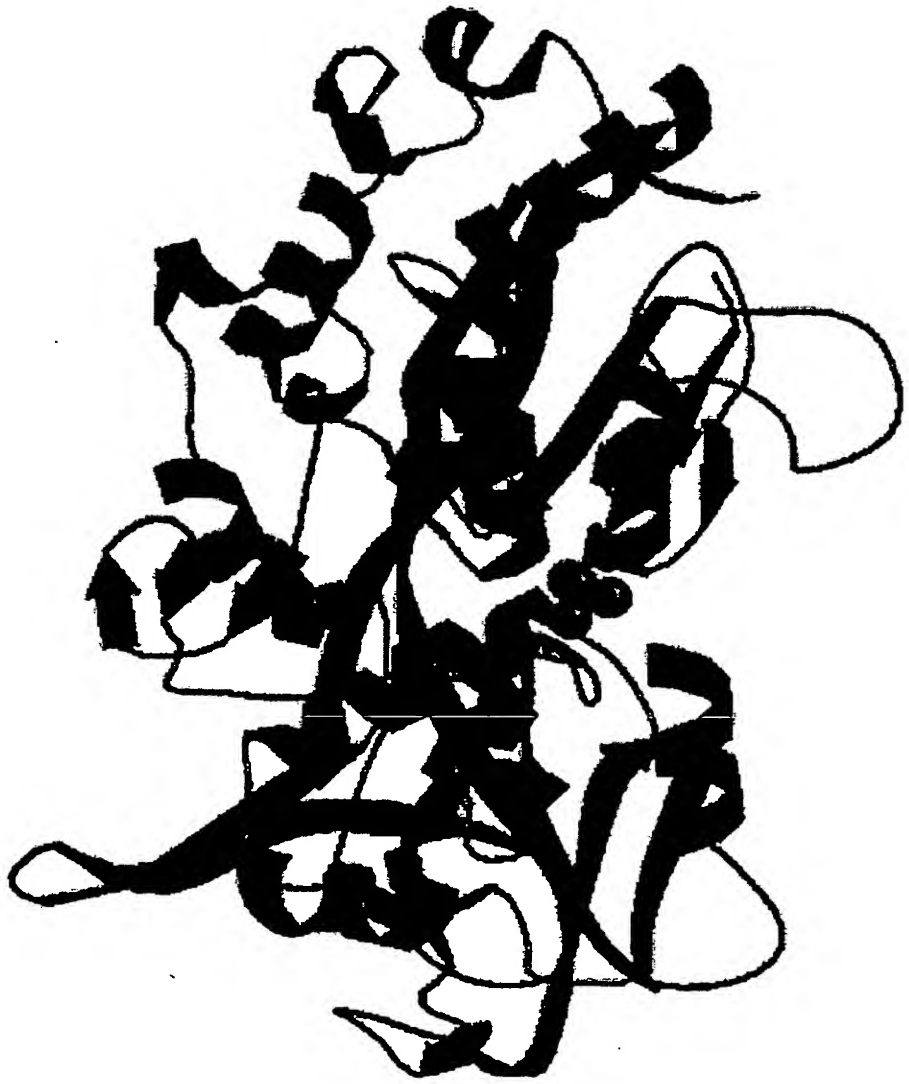

FIGURE 2

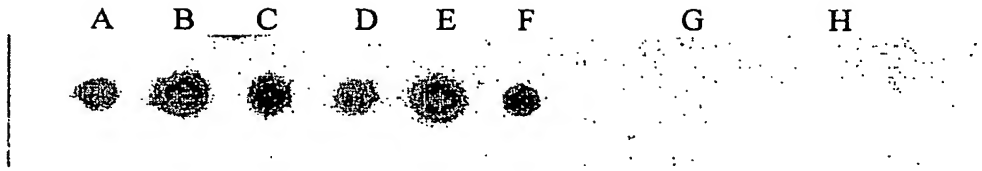

FIGURE 3

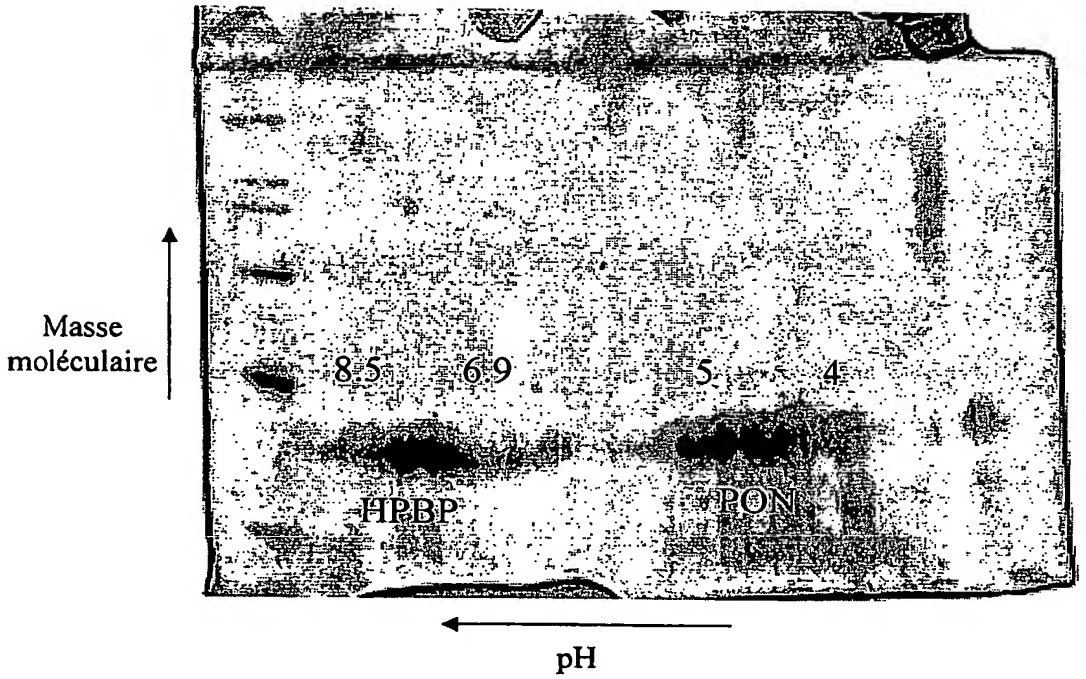

FIGURE 4

```
ATOM      1  CB  SER A   1      24.666  45.653  14.370  1.00 26.15      A
ATOM      2  OG  SER A   1      25.258  46.028  13.130  1.00 38.82      A
ATOM      3  C   SER A   1      22.519  45.324  15.622  1.00 20.30      A
ATOM      4  O   SER A   1      21.889  46.093  16.367  1.00 18.83      A
ATOM      5  N   SER A   1      22.817  47.273  14.074  1.00 22.37      A
ATOM      6  CA  SER A   1      23.146  45.831  14.317  1.00 22.87      A
ATOM      7  N   ILE A   2      22.676  44.027  15.878  1.00 14.00      A
ATOM      8  CA  ILE A   2      22.149  43.401  17.092  1.00 13.36      A
ATOM      9  CB  ILE A   2      21.747  41.923  16.828  1.00 14.04      A
ATOM     10  CG2 ILE A   2      21.536  41.191  18.155  1.00  9.05      A
ATOM     11  CG1 ILE A   2      20.458  41.872  15.988  1.00 13.38      A
ATOM     12  CD1 ILE A   2      20.173  40.501  15.357  1.00 14.27      A
ATOM     13  C   ILE A   2      23.303  43.459  18.083  1.00 12.32      A
ATOM     14  O   ILE A   2      24.376  42.890  17.847  1.00 14.26      A
ATOM     15  N   ASP A   3      23.075  44.122  19.205  1.00 13.19      A
ATOM     16  CA  ASP A   3      24.134  44.331  20.193  1.00 11.15      A
ATOM     17  CB  ASP A   3      24.149  45.830  20.578  1.00 12.52      A
ATOM     18  CG  ASP A   3      24.268  46.744  19.351  1.00 11.70      A
ATOM     19  OD1 ASP A   3      25.289  46.618  18.642  1.00 11.97      A
ATOM     20  OD2 ASP A   3      23.356  47.569  19.094  1.00 13.82      A
ATOM     21  C   ASP A   3      23.981  43.508  21.456  1.00 11.88      A
ATOM     22  O   ASP A   3      22.947  43.577  22.116  1.00 11.48      A
ATOM     23  N   GLY A   4      25.022  42.763  21.800  1.00  9.46      A
ATOM     24  CA  GLY A   4      24.973  41.947  23.007  1.00 10.97      A
ATOM     25  C   GLY A   4      26.303  41.966  23.740  1.00  8.48      A
ATOM     26  O   GLY A   4      27.314  42.413  23.200  1.00  9.87      A
ATOM     27  N   GLY A   5      26.296  41.496  24.987  1.00 11.77      A
ATOM     28  CA  GLY A   5      27.511  41.489  25.785  1.00  4.85      A
ATOM     29  C   GLY A   5      27.163  41.000  27.186  1.00  8.06      A
ATOM     30  O   GLY A   5      26.009  40.610  27.447  1.00  9.13      A
ATOM     31  N   GLY A   6      28.144  41.021  28.089  1.00  9.80      A
ATOM     32  CA  GLY A   6      27.898  40.589  29.458  1.00  9.86      A
ATOM     33  C   GLY A   6      28.970  39.679  30.014  1.00  7.11      A
ATOM     34  O   GLY A   6      30.150  40.030  30.000  1.00  8.89      A
ATOM     35  N   ALA A   7      28.567  38.518  30.525  1.00  9.08      A
ATOM     36  CA  ALA A   7      29.509  37.540  31.079  1.00  8.69      A
ATOM     37  CB  ALA A   7      28.814  36.168  31.195  1.00  7.94      A
ATOM     38  C   ALA A   7      30.811  37.363  30.277  1.00  9.69      A
ATOM     39  O   ALA A   7      30.781  37.212  29.050  1.00  7.30      A
ATOM     40  N   THR A   8      31.941  37.367  30.981  1.00  7.56      A
ATOM     41  CA  THR A   8      33.236  37.135  30.338  1.00  7.21      A
ATOM     42  CB  THR A   8      34.402  37.865  31.065  1.00  8.00      A
ATOM     43  OG1 THR A   8      34.532  37.344  32.402  1.00  9.83      A
ATOM     44  CG2 THR A   8      34.123  39.388  31.139  1.00 10.68      A
ATOM     45  C   THR A   8      33.542  35.624  30.340  1.00  5.67      A
ATOM     46  O   THR A   8      34.355  35.168  29.552  1.00  8.00      A
ATOM     47  N   LEU A   9      32.885  34.842  31.195  1.00  6.65      A
ATOM     48  CA  LEU A   9      33.190  33.389  31.224  1.00  9.98      A
ATOM     49  CB  LEU A   9      32.275  32.649  32.238  1.00 10.55      A
ATOM     50  CG  LEU A   9      32.400  31.109  32.271  1.00 11.53      A
ATOM     51  CD1 LEU A   9      32.200  30.566  33.699  1.00 10.77      A
ATOM     52  CD2 LEU A   9      31.356  30.503  31.300  1.00  6.94      A
ATOM     53  C   LEU A   9      33.103  32.755  29.817  1.00 10.91      A
ATOM     54  O   LEU A   9      33.985  31.970  29.421  1.00  9.67      A
ATOM     55  N   PRO A  10      32.051  33.088  29.040  1.00  6.59      A
ATOM     56  CD  PRO A  10      30.763  33.664  29.485  1.00  8.09      A
ATOM     57  CA  PRO A  10      31.915  32.521  27.686  1.00  7.68      A
ATOM     58  CB  PRO A  10      30.428  32.218  27.611  1.00 11.73      A
ATOM     59  CG  PRO A  10      29.845  33.467  28.251  1.00  8.40      A
ATOM     60  C   PRO A  10      32.317  33.504  26.579  1.00  8.72      A
ATOM     61  O   PRO A  10      32.040  33.263  25.396  1.00  9.01      A
ATOM     62  N   GLU A  11      33.003  34.589  26.928  1.00  5.35      A
ATOM     63  CA  GLU A  11      33.325  35.565  25.896  1.00  8.04      A
ATOM     64  CB  GLU A  11      33.978  36.829  26.493  1.00 12.60      A
ATOM     65  CG  GLU A  11      35.380  36.672  27.001  1.00 21.32      A
ATOM     66  CD  GLU A  11      35.994  38.013  27.391  1.00 26.61      A
ATOM     67  OE1 GLU A  11      35.264  38.873  27.920  1.00 30.93      A
ATOM     68  OE2 GLU A  11      37.203  38.202  27.176  1.00 31.32      A
ATOM     69  C   GLU A  11      34.143  35.066  24.709  1.00 10.00      A
ATOM     70  O   GLU A  11      33.866  35.464  23.563  1.00  8.68      A
ATOM     71  N   LYS A  12      35.134  34.215  24.957  1.00  8.65      A
ATOM     72  CA  LYS A  12      35.935  33.678  23.850  1.00 10.43      A
ATOM     73  CB  LYS A  12      37.081  32.840  24.374  1.00 11.05      A
ATOM     74  CG  LYS A  12      38.151  33.646  25.090  1.00  9.26      A
ATOM     75  CD  LYS A  12      39.117  32.622  25.673  1.00 17.64      A
```

FIGURE 5

ATOM	76	CE	LYS	A	12	40.293	33.277	26.307	1.00	24.93	A
ATOM	77	NZ	LYS	A	12	41.298	32.237	26.600	1.00	25.96	A
ATOM	78	C	LYS	A	12	35.079	32.830	22.934	1.00	11.17	A
ATOM	79	O	LYS	A	12	35.339	32.726	21.736	1.00	8.79	A
ATOM	80	N	LEU	A	13	34.071	32.176	23.498	1.00	7.67	A
ATOM	81	CA	LEU	A	13	33.189	31.383	22.669	1.00	10.04	A
ATOM	82	CB	LEU	A	13	32.230	30.549	23.534	1.00	8.86	A
ATOM	83	CG	LEU	A	13	31.082	29.888	22.769	1.00	8.97	A
ATOM	84	CD1	LEU	A	13	31.649	28.807	21.805	1.00	12.12	A
ATOM	85	CD2	LEU	A	13	30.101	29.268	23.753	1.00	12.69	A
ATOM	86	C	LEU	A	13	32.371	32.292	21.750	1.00	9.01	A
ATOM	87	O	LEU	A	13	32.293	32.064	20.536	1.00	10.60	A
ATOM	88	N	TYR	A	14	31.761	33.329	22.305	1.00	10.47	A
ATOM	89	CA	TYR	A	14	30.920	34.195	21.482	1.00	9.03	A
ATOM	90	CB	TYR	A	14	30.029	35.087	22.352	1.00	8.38	A
ATOM	91	CG	TYR	A	14	29.091	34.293	23.253	1.00	11.48	A
ATOM	92	CD1	TYR	A	14	28.499	33.109	22.806	1.00	12.01	A
ATOM	93	CE1	TYR	A	14	27.671	32.341	23.642	1.00	10.45	A
ATOM	94	CD2	TYR	A	14	28.824	34.706	24.564	1.00	10.30	A
ATOM	95	CE2	TYR	A	14	27.998	33.948	25.403	1.00	10.35	A
ATOM	96	CZ	TYR	A	14	27.430	32.766	24.933	1.00	8.21	A
ATOM	97	OH	TYR	A	14	26.628	32.014	25.757	1.00	8.65	A
ATOM	98	C	TYR	A	14	31.715	35.036	20.489	1.00	9.67	A
ATOM	99	O	TYR	A	14	31.142	35.538	19.515	1.00	8.36	A
ATOM	100	N	LEU	A	15	33.021	35.184	20.738	1.00	8.53	A
ATOM	101	CA	LEU	A	15	33.904	35.936	19.838	1.00	9.45	A
ATOM	102	CB	LEU	A	15	35.087	36.564	20.601	1.00	8.09	A
ATOM	103	CG	LEU	A	15	34.742	37.802	21.433	1.00	14.85	A
ATOM	104	CD1	LEU	A	15	35.932	38.141	22.306	1.00	16.07	A
ATOM	105	CD2	LEU	A	15	34.364	38.990	20.510	1.00	12.61	A
ATOM	106	C	LEU	A	15	34.467	35.018	18.756	1.00	16.00	A
ATOM	107	O	LEU	A	15	35.174	35.466	17.859	1.00	16.13	A
ATOM	108	N	THR	A	16	34.178	33.729	18.848	1.00	11.70	A
ATOM	109	CA	THR	A	16	34.681	32.791	17.853	1.00	11.09	A
ATOM	110	CB	THR	A	16	34.523	31.334	18.371	1.00	11.33	A
ATOM	111	OG1	THR	A	16	35.406	31.142	19.484	1.00	13.08	A
ATOM	112	CG2	THR	A	16	34.848	30.314	17.291	1.00	11.23	A
ATOM	113	C	THR	A	16	33.906	32.997	16.549	1.00	12.10	A
ATOM	114	O	THR	A	16	32.671	32.996	16.540	1.00	12.20	A
ATOM	115	N	PRO	A	17	34.620	33.158	15.420	1.00	14.18	A
ATOM	116	CD	PRO	A	17	36.085	33.162	15.251	1.00	14.83	A
ATOM	117	CA	PRO	A	17	33.933	33.367	14.137	1.00	17.90	A
ATOM	118	CB	PRO	A	17	35.068	33.292	13.113	1.00	20.97	A
ATOM	119	CG	PRO	A	17	36.251	33.842	13.890	1.00	21.64	A
ATOM	120	C	PRO	A	17	32.830	32.341	13.854	1.00	14.42	A
ATOM	121	O	PRO	A	17	33.027	31.143	14.066	1.00	14.18	A
ATOM	122	N	ASP	A	18	31.673	32.836	13.414	1.00	15.17	A
ATOM	123	CA	ASP	A	18	30.515	32.020	13.058	1.00	19.19	A
ATOM	124	CB	ASP	A	18	30.932	30.829	12.169	1.00	23.04	A
ATOM	125	CG	ASP	A	18	31.649	31.260	10.885	1.00	30.30	A
ATOM	126	OD1	ASP	A	18	31.214	32.238	10.239	1.00	30.86	A
ATOM	127	OD2	ASP	A	18	32.645	30.599	10.511	1.00	39.65	A
ATOM	128	C	ASP	A	18	29.657	31.479	14.212	1.00	13.08	A
ATOM	129	O	ASP	A	18	28.651	30.833	13.958	1.00	13.28	A
ATOM	130	N	VAL	A	19	30.041	31.709	15.466	1.00	13.07	A
ATOM	131	CA	VAL	A	19	29.199	31.221	16.570	1.00	8.94	A
ATOM	132	CB	VAL	A	19	29.976	31.225	17.911	1.00	9.65	A
ATOM	133	CG1	VAL	A	19	29.014	31.123	19.098	1.00	11.73	A
ATOM	134	CG2	VAL	A	19	30.930	30.026	17.923	1.00	11.99	A
ATOM	135	C	VAL	A	19	27.971	32.126	16.613	1.00	11.81	A
ATOM	136	O	VAL	A	19	26.829	31.655	16.707	1.00	11.21	A
ATOM	137	N	LEU	A	20	28.198	33.434	16.567	1.00	10.93	A
ATOM	138	CA	LEU	A	20	27.077	34.363	16.486	1.00	8.58	A
ATOM	139	CB	LEU	A	20	27.439	35.730	17.084	1.00	13.44	A
ATOM	140	CG	LEU	A	20	27.677	35.767	18.601	1.00	14.24	A
ATOM	141	CD1	LEU	A	20	27.863	37.222	19.084	1.00	13.26	A
ATOM	142	CD2	LEU	A	20	26.480	35.130	19.315	1.00	11.94	A
ATOM	143	C	LEU	A	20	26.857	34.470	14.969	1.00	15.21	A
ATOM	144	O	LEU	A	20	27.836	34.550	14.196	1.00	11.72	A
ATOM	145	N	THR	A	21	25.596	34.455	14.540	1.00	14.05	A
ATOM	146	CA	THR	A	21	25.268	34.511	13.114	1.00	12.27	A
ATOM	147	CB	THR	A	21	24.006	33.653	12.865	1.00	16.46	A
ATOM	148	OG1	THR	A	21	22.966	34.044	13.774	1.00	13.53	A
ATOM	149	CG2	THR	A	21	24.326	32.173	13.121	1.00	17.80	A
ATOM	150	C	THR	A	21	25.121	35.937	12.509	1.00	14.67	A
ATOM	151	O	THR	A	21	25.452	36.928	13.148	1.00	12.04	A

FIGURE 5 (suite)

ATOM	152	N	ALA	A	22	24.663	36.037	11.265	1.00	12.98	A
ATOM	153	CA	ALA	A	22	24.523	37.335	10.594	1.00	12.25	A
ATOM	154	CB	ALA	A	22	23.913	37.146	9.208	1.00	15.06	A
ATOM	155	C	ALA	A	22	23.749	38.418	11.337	1.00	10.99	A
ATOM	156	O	ALA	A	22	22.688	38.174	11.916	1.00	15.12	A
ATOM	157	N	GLY	A	23	24.285	39.636	11.292	1.00	13.67	A
ATOM	158	CA	GLY	A	23	23.631	40.753	11.951	1.00	14.86	A
ATOM	159	C	GLY	A	23	24.068	41.057	13.371	1.00	14.29	A
ATOM	160	O	GLY	A	23	23.775	42.138	13.894	1.00	15.41	A
ATOM	161	N	PHE	A	24	24.760	40.116	14.001	1.00	12.44	A
ATOM	162	CA	PHE	A	24	25.238	40.283	15.363	1.00	14.48	A
ATOM	163	CB	PHE	A	24	25.424	38.899	16.020	1.00	9.89	A
ATOM	164	CG	PHE	A	24	24.156	38.276	16.527	1.00	12.35	A
ATOM	165	CD1	PHE	A	24	23.225	37.734	15.644	1.00	6.46	A
ATOM	166	CD2	PHE	A	24	23.888	38.237	17.898	1.00	12.73	A
ATOM	167	CE1	PHE	A	24	22.035	37.153	16.125	1.00	11.12	A
ATOM	168	CE2	PHE	A	24	22.695	37.662	18.397	1.00	7.42	A
ATOM	169	CZ	PHE	A	24	21.772	37.118	17.502	1.00	11.79	A
ATOM	170	C	PHE	A	24	26.584	41.030	15.444	1.00	14.36	A
ATOM	171	O	PHE	A	24	27.569	40.592	14.850	1.00	12.41	A
ATOM	172	N	ALA	A	25	26.630	42.141	16.183	1.00	14.60	A
ATOM	173	CA	ALA	A	25	27.881	42.875	16.378	1.00	13.54	A
ATOM	174	CB	ALA	A	25	27.606	44.233	17.024	1.00	15.19	A
ATOM	175	C	ALA	A	25	28.752	42.031	17.315	1.00	12.48	A
ATOM	176	O	ALA	A	25	28.240	41.155	18.023	1.00	12.61	A
ATOM	177	N	PRO	A	26	30.067	42.289	17.348	1.00	11.27	A
ATOM	178	CD	PRO	A	26	30.837	43.202	16.476	1.00	13.96	A
ATOM	179	CA	PRO	A	26	30.952	41.507	18.231	1.00	12.70	A
ATOM	180	CB	PRO	A	26	32.334	42.117	17.989	1.00	14.99	A
ATOM	181	CG	PRO	A	26	32.241	42.582	16.519	1.00	19.22	A
ATOM	182	C	PRO	A	26	30.536	41.602	19.699	1.00	10.57	A
ATOM	183	O	PRO	A	26	30.222	42.681	20.192	1.00	10.54	A
ATOM	184	N	TYR	A	27	30.529	40.456	20.367	1.00	8.04	A
ATOM	185	CA	TYR	A	27	30.161	40.345	21.793	1.00	9.13	A
ATOM	186	CB	TYR	A	27	30.294	38.886	22.231	1.00	8.74	A
ATOM	187	CG	TYR	A	27	29.824	38.612	23.648	1.00	5.12	A
ATOM	188	CD1	TYR	A	27	28.469	38.512	23.938	1.00	6.81	A
ATOM	189	CE1	TYR	A	27	28.024	38.224	25.247	1.00	9.00	A
ATOM	190	CD2	TYR	A	27	30.741	38.423	24.682	1.00	5.70	A
ATOM	191	CE2	TYR	A	27	30.310	38.131	25.992	1.00	7.78	A
ATOM	192	CZ	TYR	A	27	28.948	38.032	26.259	1.00	9.36	A
ATOM	193	OH	TYR	A	27	28.502	37.709	27.532	1.00	8.37	A
ATOM	194	C	TYR	A	27	31.081	41.207	22.675	1.00	10.49	A
ATOM	195	O	TYR	A	27	32.297	41.207	22.494	1.00	9.91	A
ATOM	196	N	ILE	A	28	30.510	41.931	23.635	1.00	8.97	A
ATOM	197	CA	ILE	A	28	31.324	42.765	24.517	1.00	12.31	A
ATOM	198	CB	ILE	A	28	30.801	44.225	24.521	1.00	13.61	A
ATOM	199	CG2	ILE	A	28	31.657	45.098	25.459	1.00	13.95	A
ATOM	200	CG1	ILE	A	28	30.871	44.793	23.095	1.00	11.91	A
ATOM	201	CD1	ILE	A	28	30.192	46.146	22.915	1.00	12.92	A
ATOM	202	C	ILE	A	28	31.333	42.191	25.942	1.00	13.14	A
ATOM	203	O	ILE	A	28	30.315	42.189	26.622	1.00	8.79	A
ATOM	204	N	GLY	A	29	32.499	41.706	26.373	1.00	13.23	A
ATOM	205	CA	GLY	A	29	32.630	41.105	27.695	1.00	15.83	A
ATOM	206	C	GLY	A	29	32.868	42.127	28.791	1.00	16.10	A
ATOM	207	O	GLY	A	29	33.915	42.794	28.826	1.00	12.27	A
ATOM	208	N	THR	A	30	31.900	42.234	29.697	1.00	8.70	A
ATOM	209	CA	THR	A	30	31.966	43.200	30.783	1.00	10.71	A
ATOM	210	CB	THR	A	30	31.061	44.442	30.473	1.00	11.83	A
ATOM	211	OG1	THR	A	30	29.703	44.014	30.222	1.00	16.91	A
ATOM	212	CG2	THR	A	30	31.607	45.235	29.249	1.00	8.83	A
ATOM	213	C	THR	A	30	31.538	42.640	32.147	1.00	11.78	A
ATOM	214	O	THR	A	30	31.532	43.378	33.135	1.00	11.34	A
ATOM	215	N	GLY	A	31	31.187	41.352	32.210	1.00	10.41	A
ATOM	216	CA	GLY	A	31	30.729	40.789	33.473	1.00	8.40	A
ATOM	217	C	GLY	A	31	29.208	40.604	33.467	1.00	9.64	A
ATOM	218	O	GLY	A	31	28.478	41.396	32.862	1.00	8.01	A
ATOM	219	N	SER	A	32	28.718	39.566	34.138	1.00	7.93	A
ATOM	220	CA	SER	A	32	27.274	39.297	34.143	1.00	4.39	A
ATOM	221	CB	SER	A	32	26.961	37.954	34.832	1.00	2.86	A
ATOM	222	OG	SER	A	32	27.538	36.876	34.125	1.00	6.73	A
ATOM	223	C	SER	A	32	26.440	40.386	34.793	1.00	7.61	A
ATOM	224	O	SER	A	32	25.321	40.626	34.354	1.00	9.70	A
ATOM	225	N	GLY	A	33	26.984	41.052	35.811	1.00	8.20	A
ATOM	226	CA	GLY	A	33	26.256	42.121	36.506	1.00	6.91	A

FIGURE 5 (suite)

ATOM	227	C	GLY	A	33	25.942	43.235	35.524	1.00	9.16	A
ATOM	228	O	GLY	A	33	24.799	43.708	35.429	1.00	9.95	A
ATOM	229	N	LYS	A	34	26.943	43.633	34.749	1.00	10.60	A
ATOM	230	CA	LYS	A	34	26.710	44.681	33.758	1.00	8.52	A
ATOM	231	CB	LYS	A	34	28.040	45.240	33.250	1.00	7.07	A
ATOM	232	CG	LYS	A	34	28.667	46.220	34.250	1.00	12.80	A
ATOM	233	CD	LYS	A	34	29.957	46.854	33.703	1.00	10.66	A
ATOM	234	CE	LYS	A	34	30.597	47.768	34.748	1.00	10.90	A
ATOM	235	NZ	LYS	A	34	29.700	48.890	35.066	1.00	23.47	A
ATOM	236	C	LYS	A	34	25.848	44.201	32.601	1.00	12.94	A
ATOM	237	O	LYS	A	34	25.070	44.977	32.043	1.00	9.59	A
ATOM	238	N	GLY	A	35	25.983	42.928	32.236	1.00	9.69	A
ATOM	239	CA	GLY	A	35	25.158	42.386	31.162	1.00	7.50	A
ATOM	240	C	GLY	A	35	23.677	42.414	31.542	1.00	9.68	A
ATOM	241	O	GLY	A	35	22.831	42.767	30.717	1.00	9.00	A
ATOM	242	N	LYS	A	36	23.340	42.077	32.787	1.00	8.56	A
ATOM	243	CA	LYS	A	36	21.929	42.089	33.173	1.00	7.26	A
ATOM	244	CB	LYS	A	36	21.709	41.393	34.533	1.00	9.15	A
ATOM	245	CG	LYS	A	36	21.954	39.861	34.445	1.00	5.28	A
ATOM	246	CD	LYS	A	36	21.394	39.069	35.662	1.00	6.85	A
ATOM	247	CE	LYS	A	36	21.990	39.576	36.986	1.00	11.53	A
ATOM	248	NZ	LYS	A	36	21.397	38.945	38.221	1.00	11.99	A
ATOM	249	C	LYS	A	36	21.409	43.527	33.204	1.00	11.18	A
ATOM	250	O	LYS	A	36	20.311	43.787	32.724	1.00	14.03	A
ATOM	251	N	ILE	A	37	22.190	44.459	33.749	1.00	9.12	A
ATOM	252	CA	ILE	A	37	21.752	45.854	33.766	1.00	11.15	A
ATOM	253	CB	ILE	A	37	22.778	46.779	34.462	1.00	10.46	A
ATOM	254	CG2	ILE	A	37	22.424	48.252	34.197	1.00	11.32	A
ATOM	255	CG1	ILE	A	37	22.774	46.522	35.972	1.00	9.50	A
ATOM	256	CD1	ILE	A	37	24.024	47.029	36.669	1.00	15.62	A
ATOM	257	C	ILE	A	37	21.563	46.368	32.325	1.00	11.78	A
ATOM	258	O	ILE	A	37	20.570	47.017	32.018	1.00	11.36	A
ATOM	259	N	ALA	A	38	22.518	46.071	31.452	1.00	9.31	A
ATOM	260	CA	ALA	A	38	22.438	46.539	30.063	1.00	10.19	A
ATOM	261	CB	ALA	A	38	23.650	46.016	29.269	1.00	10.93	A
ATOM	262	C	ALA	A	38	21.129	46.102	29.375	1.00	9.69	A
ATOM	263	O	ALA	A	38	20.447	46.899	28.712	1.00	8.41	A
ATOM	264	N	PHE	A	39	20.771	44.831	29.541	1.00	8.70	A
ATOM	265	CA	PHE	A	39	19.566	44.327	28.914	1.00	9.40	A
ATOM	266	CB	PHE	A	39	19.549	42.787	28.888	1.00	9.06	A
ATOM	267	CG	PHE	A	39	18.287	42.214	28.270	1.00	7.16	A
ATOM	268	CD1	PHE	A	39	18.223	41.953	26.896	1.00	8.56	A
ATOM	269	CD2	PHE	A	39	17.146	42.000	29.051	1.00	8.19	A
ATOM	270	CE1	PHE	A	39	17.035	41.481	26.306	1.00	9.12	A
ATOM	271	CE2	PHE	A	39	15.947	41.530	28.479	1.00	9.01	A
ATOM	272	CZ	PHE	A	39	15.888	41.269	27.101	1.00	8.28	A
ATOM	273	C	PHE	A	39	18.304	44.790	29.608	1.00	12.15	A
ATOM	274	O	PHE	A	39	17.398	45.313	28.972	1.00	10.76	A
ATOM	275	N	LEU	A	40	18.246	44.602	30.920	1.00	8.71	A
ATOM	276	CA	LEU	A	40	17.034	44.938	31.678	1.00	8.94	A
ATOM	277	CB	LEU	A	40	17.204	44.513	33.144	1.00	7.80	A
ATOM	278	CG	LEU	A	40	17.342	43.005	33.400	1.00	10.06	A
ATOM	279	CD1	LEU	A	40	17.809	42.781	34.887	1.00	6.45	A
ATOM	280	CD2	LEU	A	40	16.006	42.296	33.132	1.00	12.55	A
ATOM	281	C	LEU	A	40	16.626	46.403	31.632	1.00	10.63	A
ATOM	282	O	LEU	A	40	15.430	46.730	31.629	1.00	11.89	A
ATOM	283	N	GLU	A	41	17.604	47.291	31.586	1.00	10.88	A
ATOM	284	CA	GLU	A	41	17.294	48.717	31.551	1.00	9.10	A
ATOM	285	CB	GLU	A	41	18.053	49.436	32.669	1.00	13.20	A
ATOM	286	CG	GLU	A	41	17.802	48.829	34.036	1.00	11.00	A
ATOM	287	CD	GLU	A	41	18.671	49.429	35.131	1.00	22.54	A
ATOM	288	OE1	GLU	A	41	18.975	48.713	36.103	1.00	27.36	A
ATOM	289	OE2	GLU	A	41	19.037	50.616	35.043	1.00	22.49	A
ATOM	290	C	GLU	A	41	17.633	49.361	30.218	1.00	12.72	A
ATOM	291	O	GLU	A	41	17.505	50.576	30.066	1.00	13.60	A
ATOM	292	N	ASN	A	42	18.010	48.537	29.238	1.00	11.74	A
ATOM	293	CA	ASN	A	42	18.463	49.008	27.923	1.00	11.79	A
ATOM	294	CB	ASN	A	42	17.322	49.494	27.022	1.00	14.08	A
ATOM	295	CG	ASN	A	42	17.824	49.897	25.642	1.00	16.54	A
ATOM	296	OD1	ASN	A	42	18.885	49.428	25.189	1.00	15.67	A
ATOM	297	ND2	ASN	A	42	17.076	50.763	24.960	1.00	14.22	A
ATOM	298	C	ASN	A	42	19.486	50.126	28.091	1.00	16.68	A
ATOM	299	O	ASN	A	42	19.300	51.260	27.631	1.00	14.27	A
ATOM	300	N	SER	A	43	20.578	49.789	28.767	1.00	14.51	A

FIGURE 5 (suite)

```
ATOM    301  CA  SER A  43      21.665  50.740  29.001  1.00 14.54      A
ATOM    302  CB  SER A  43      21.920  50.874  30.520  1.00 19.90      A
ATOM    303  OG  SER A  43      20.922  51.662  31.162  1.00 26.26      A
ATOM    304  C   SER A  43      22.965  50.327  28.302  1.00 13.78      A
ATOM    305  O   SER A  43      23.790  49.633  28.891  1.00 10.60      A
ATOM    306  N   TYR A  44      23.168  50.755  27.056  1.00  9.73      A
ATOM    307  CA  TYR A  44      24.396  50.401  26.361  1.00 10.86      A
ATOM    308  CB  TYR A  44      24.330  50.880  24.904  1.00 10.54      A
ATOM    309  CG  TYR A  44      25.414  50.311  24.034  1.00 12.22      A
ATOM    310  CD1 TYR A  44      26.631  50.983  23.857  1.00 12.57      A
ATOM    311  CE1 TYR A  44      27.625  50.469  23.011  1.00 10.91      A
ATOM    312  CD2 TYR A  44      25.217  49.106  23.357  1.00 10.34      A
ATOM    313  CE2 TYR A  44      26.201  48.587  22.517  1.00 11.21      A
ATOM    314  CZ  TYR A  44      27.394  49.267  22.347  1.00 14.12      A
ATOM    315  OH  TYR A  44      28.357  48.725  21.524  1.00 11.54      A
ATOM    316  C   TYR A  44      25.650  50.971  27.026  1.00  8.02      A
ATOM    317  O   TYR A  44      26.775  50.515  26.756  1.00 10.36      A
ATOM    318  N   ASN A  45      25.484  51.941  27.917  1.00  8.55      A
ATOM    319  CA  ASN A  45      26.657  52.547  28.535  1.00 14.36      A
ATOM    320  CB  ASN A  45      26.271  53.811  29.337  1.00  8.69      A
ATOM    321  CG  ASN A  45      25.707  53.503  30.708  1.00 11.69      A
ATOM    322  OD1 ASN A  45      25.048  52.488  30.910  1.00 13.56      A
ATOM    323  ND2 ASN A  45      25.934  54.411  31.655  1.00 14.48      A
ATOM    324  C   ASN A  45      27.423  51.535  29.388  1.00 13.91      A
ATOM    325  O   ASN A  45      28.573  51.781  29.755  1.00 11.13      A
ATOM    326  N   GLN A  46      26.788  50.393  29.681  1.00  8.83      A
ATOM    327  CA  GLN A  46      27.462  49.337  30.435  1.00 11.62      A
ATOM    328  CB  GLN A  46      26.421  48.390  31.080  1.00 10.13      A
ATOM    329  CG  GLN A  46      25.487  49.076  32.083  1.00 14.66      A
ATOM    330  CD  GLN A  46      26.259  49.792  33.170  1.00 18.72      A
ATOM    331  OE1 GLN A  46      26.983  49.165  33.937  1.00 18.65      A
ATOM    332  NE2 GLN A  46      26.133  51.116  33.228  1.00 16.99      A
ATOM    333  C   GLN A  46      28.408  48.543  29.491  1.00 10.06      A
ATOM    334  O   GLN A  46      29.275  47.818  29.956  1.00 10.43      A
ATOM    335  N   PHE A  47      28.232  48.691  28.174  1.00  8.72      A
ATOM    336  CA  PHE A  47      29.055  48.025  27.148  1.00  7.46      A
ATOM    337  CB  PHE A  47      28.191  47.487  25.992  1.00  7.56      A
ATOM    338  CG  PHE A  47      27.271  46.349  26.366  1.00 12.11      A
ATOM    339  CD1 PHE A  47      27.433  45.651  27.559  1.00 11.35      A
ATOM    340  CD2 PHE A  47      26.268  45.945  25.474  1.00 14.21      A
ATOM    341  CE1 PHE A  47      26.616  44.567  27.861  1.00  9.31      A
ATOM    342  CE2 PHE A  47      25.442  44.859  25.761  1.00  9.84      A
ATOM    343  CZ  PHE A  47      25.617  44.167  26.959  1.00 10.19      A
ATOM    344  C   PHE A  47      30.053  48.988  26.484  1.00 12.94      A
ATOM    345  O   PHE A  47      31.109  48.580  26.022  1.00 14.11      A
ATOM    346  N   GLY A  48      29.677  50.257  26.378  1.00 11.49      A
ATOM    347  CA  GLY A  48      30.551  51.222  25.731  1.00 13.51      A
ATOM    348  C   GLY A  48      30.027  52.642  25.833  1.00 15.44      A
ATOM    349  O   GLY A  48      28.999  52.908  26.459  1.00 16.60      A
ATOM    350  N   THR A  49      30.722  53.566  25.187  1.00 14.37      A
ATOM    351  CA  THR A  49      30.333  54.967  25.256  1.00 13.58      A
ATOM    352  CB  THR A  49      31.576  55.843  25.161  1.00 14.46      A
ATOM    353  OG1 THR A  49      32.234  55.567  23.924  1.00 15.00      A
ATOM    354  CG2 THR A  49      32.558  55.524  26.322  1.00 13.17      A
ATOM    355  C   THR A  49      29.301  55.436  24.216  1.00 14.30      A
ATOM    356  O   THR A  49      28.716  56.511  24.370  1.00 12.47      A
ATOM    357  N   ASN A  50      29.062  54.659  23.162  1.00 13.09      A
ATOM    358  CA  ASN A  50      28.076  55.116  22.173  1.00 14.85      A
ATOM    359  CB  ASN A  50      28.324  54.519  20.785  1.00 15.63      A
ATOM    360  CG  ASN A  50      27.379  55.096  19.739  1.00 18.88      A
ATOM    361  OD1 ASN A  50      26.472  55.883  20.059  1.00 19.28      A
ATOM    362  ND2 ASN A  50      27.574  54.707  18.489  1.00 19.28      A
ATOM    363  C   ASN A  50      26.669  54.751  22.615  1.00 14.82      A
ATOM    364  O   ASN A  50      26.099  53.739  22.187  1.00 14.58      A
ATOM    365  N   THR A  51      26.097  55.608  23.443  1.00 13.25      A
ATOM    366  CA  THR A  51      24.782  55.377  23.988  1.00 15.77      A
ATOM    367  CB  THR A  51      24.595  56.210  25.242  1.00 17.96      A
ATOM    368  OG1 THR A  51      24.937  57.574  24.973  1.00 16.18      A
ATOM    369  CG2 THR A  51      25.506  55.684  26.332  1.00 18.64      A
ATOM    370  C   THR A  51      23.581  55.539  23.053  1.00 18.71      A
ATOM    371  O   THR A  51      22.440  55.436  23.512  1.00 19.68      A
ATOM    372  N   THR A  52      23.820  55.795  21.761  1.00 16.82      A
ATOM    373  CA  THR A  52      22.702  55.865  20.827  1.00 19.67      A
ATOM    374  CB  THR A  52      23.017  56.666  19.524  1.00 22.55      A
ATOM    375  OG1 THR A  52      24.028  56.006  18.744  1.00 22.57      A
```

FIGURE 5 (suite)

ATOM	376	CG2	THR	A	52	23.460	58.081	19.875	1.00	21.07	A
ATOM	377	C	THR	A	52	22.342	54.428	20.446	1.00	17.92	A
ATOM	378	O	THR	A	52	21.270	54.175	19.905	1.00	17.96	A
ATOM	379	N	LYS	A	53	23.238	53.488	20.740	1.00	14.41	A
ATOM	380	CA	LYS	A	53	22.978	52.080	20.427	1.00	12.53	A
ATOM	381	CB	LYS	A	53	24.292	51.292	20.406	1.00	14.33	A
ATOM	382	CG	LYS	A	53	25.207	51.573	19.213	1.00	17.93	A
ATOM	383	CD	LYS	A	53	26.478	50.731	19.324	1.00	18.20	A
ATOM	384	CE	LYS	A	53	27.477	51.052	18.214	1.00	21.01	A
ATOM	385	NZ	LYS	A	53	26.908	50.784	16.865	1.00	22.67	A
ATOM	386	C	LYS	A	53	22.045	51.470	21.474	1.00	12.72	A
ATOM	387	O	LYS	A	53	22.075	51.869	22.635	1.00	11.93	A
ATOM	388	N	ASP	A	54	21.223	50.499	21.064	1.00	13.58	A
ATOM	389	CA	ASP	A	54	20.298	49.826	21.982	1.00	10.96	A
ATOM	390	CB	ASP	A	54	18.887	49.745	21.380	1.00	12.81	A
ATOM	391	CG	ASP	A	54	18.249	51.107	21.218	1.00	19.07	A
ATOM	392	OD1	ASP	A	54	18.010	51.529	20.059	1.00	17.31	A
ATOM	393	OD2	ASP	A	54	17.997	51.759	22.260	1.00	15.46	A
ATOM	394	C	ASP	A	54	20.819	48.416	22.246	1.00	8.44	A
ATOM	395	O	ASP	A	54	21.505	47.837	21.407	1.00	14.56	A
ATOM	396	N	VAL	A	55	20.485	47.875	23.411	1.00	12.75	A
ATOM	397	CA	VAL	A	55	20.919	46.541	23.799	1.00	12.22	A
ATOM	398	CB	VAL	A	55	21.150	46.486	25.328	1.00	7.89	A
ATOM	399	CG1	VAL	A	55	21.596	45.057	25.775	1.00	7.35	A
ATOM	400	CG2	VAL	A	55	22.229	47.518	25.707	1.00	6.23	A
ATOM	401	C	VAL	A	55	19.840	45.540	23.386	1.00	9.36	A
ATOM	402	O	VAL	A	55	18.659	45.768	23.630	1.00	11.95	A
ATOM	403	N	HIS	A	56	20.258	44.441	22.755	1.00	9.82	A
ATOM	404	CA	HIS	A	56	19.323	43.432	22.285	1.00	8.89	A
ATOM	405	CB	HIS	A	56	19.552	43.218	20.782	1.00	8.33	A
ATOM	406	CG	HIS	A	56	19.455	44.485	19.985	1.00	9.48	A
ATOM	407	CD2	HIS	A	56	20.414	45.264	19.430	1.00	11.14	A
ATOM	408	ND1	HIS	A	56	18.255	45.121	19.738	1.00	13.82	A
ATOM	409	CE1	HIS	A	56	18.483	46.236	19.064	1.00	12.14	A
ATOM	410	NE2	HIS	A	56	19.783	46.345	18.866	1.00	12.83	A
ATOM	411	C	HIS	A	56	19.389	42.097	23.033	1.00	9.87	A
ATOM	412	O	HIS	A	56	18.419	41.331	23.039	1.00	8.84	A
ATOM	413	N	TRP	A	57	20.531	41.797	23.649	1.00	10.03	A
ATOM	414	CA	TRP	A	57	20.618	40.535	24.385	1.00	12.07	A
ATOM	415	CB	TRP	A	57	20.753	39.340	23.430	1.00	7.72	A
ATOM	416	CG	TRP	A	57	22.078	39.288	22.673	1.00	9.96	A
ATOM	417	CD2	TRP	A	57	23.188	38.398	22.935	1.00	8.55	A
ATOM	418	CE2	TRP	A	57	24.161	38.642	21.945	1.00	7.37	A
ATOM	419	CE3	TRP	A	57	23.442	37.413	23.914	1.00	9.79	A
ATOM	420	CD1	TRP	A	57	22.430	40.021	21.570	1.00	9.43	A
ATOM	421	NE1	TRP	A	57	23.685	39.637	21.124	1.00	7.89	A
ATOM	422	CZ2	TRP	A	57	25.381	37.936	21.895	1.00	8.66	A
ATOM	423	CZ3	TRP	A	57	24.647	36.713	23.862	1.00	7.59	A
ATOM	424	CH2	TRP	A	57	25.605	36.982	22.852	1.00	13.66	A
ATOM	425	C	TRP	A	57	21.830	40.575	25.286	1.00	9.35	A
ATOM	426	O	TRP	A	57	22.648	41.481	25.179	1.00	9.06	A
ATOM	427	N	ALA	A	58	21.945	39.579	26.159	1.00	6.35	A
ATOM	428	CA	ALA	A	58	23.081	39.523	27.061	1.00	8.26	A
ATOM	429	CB	ALA	A	58	22.755	40.280	28.362	1.00	10.03	A
ATOM	430	C	ALA	A	58	23.471	38.101	27.407	1.00	7.97	A
ATOM	431	O	ALA	A	58	22.638	37.207	27.401	1.00	9.27	A
ATOM	432	N	GLY	A	59	24.749	37.908	27.702	1.00	9.58	A
ATOM	433	CA	GLY	A	59	25.213	36.608	28.184	1.00	7.09	A
ATOM	434	C	GLY	A	59	25.342	36.791	29.695	1.00	9.23	A
ATOM	435	O	GLY	A	59	25.779	37.846	30.159	1.00	10.14	A
ATOM	436	N	SER	A	60	24.938	35.801	30.484	1.00	5.73	A
ATOM	437	CA	SER	A	60	25.058	35.917	31.938	1.00	5.95	A
ATOM	438	CB	SER	A	60	23.815	36.613	32.535	1.00	10.17	A
ATOM	439	OG	SER	A	60	23.896	36.707	33.966	1.00	9.12	A
ATOM	440	C	SER	A	60	25.161	34.540	32.566	1.00	8.54	A
ATOM	441	O	SER	A	60	24.437	33.632	32.146	1.00	9.12	A
ATOM	442	N	ASP	A	61	26.067	34.376	33.536	1.00	9.30	A
ATOM	443	CA	ASP	A	61	26.132	33.124	34.292	1.00	8.23	A
ATOM	444	CB	ASP	A	61	27.543	32.485	34.381	1.00	6.13	A
ATOM	445	CG	ASP	A	61	28.600	33.266	33.649	1.00	13.41	A
ATOM	446	OD1	ASP	A	61	28.869	32.961	32.449	1.00	10.15	A
ATOM	447	OD2	ASP	A	61	29.150	34.191	34.281	1.00	13.11	A
ATOM	448	C	ASP	A	61	25.597	33.456	35.710	1.00	10.77	A
ATOM	449	O	ASP	A	61	25.818	32.716	36.658	1.00	11.14	A
ATOM	450	N	SER	A	62	24.914	34.595	35.833	1.00	7.59	A
ATOM	451	CA	SER	A	62	24.213	34.995	37.067	1.00	10.29	A

FIGURE 5 (suite)

```
ATOM    452  CB  SER A  62      24.522  36.437  37.497  1.00 11.42      A
ATOM    453  OG  SER A  62      23.631  36.832  38.549  1.00 11.94      A
ATOM    454  C   SER A  62      22.721  34.944  36.706  1.00 10.70      A
ATOM    455  O   SER A  62      22.274  35.605  35.745  1.00  9.88      A
ATOM    456  N   LYS A  63      21.944  34.168  37.449  1.00  8.95      A
ATOM    457  CA  LYS A  63      20.519  34.089  37.137  1.00 10.67      A
ATOM    458  CB  LYS A  63      19.834  32.996  37.959  1.00 16.43      A
ATOM    459  CG  LYS A  63      20.046  31.605  37.461  1.00 15.34      A
ATOM    460  CD  LYS A  63      19.148  30.619  38.201  1.00 19.94      A
ATOM    461  CE  LYS A  63      17.702  30.671  37.728  1.00 16.96      A
ATOM    462  NZ  LYS A  63      16.903  29.498  38.239  1.00 14.00      A
ATOM    463  C   LYS A  63      19.786  35.392  37.399  1.00 12.40      A
ATOM    464  O   LYS A  63      20.192  36.183  38.257  1.00 10.37      A
ATOM    465  N   LEU A  64      18.699  35.604  36.659  1.00  7.10      A
ATOM    466  CA  LEU A  64      17.863  36.778  36.842  1.00  9.01      A
ATOM    467  CB  LEU A  64      16.824  36.871  35.716  1.00  6.27      A
ATOM    468  CG  LEU A  64      17.447  37.378  34.405  1.00  7.74      A
ATOM    469  CD1 LEU A  64      16.586  37.016  33.190  1.00  8.96      A
ATOM    470  CD2 LEU A  64      17.619  38.883  34.510  1.00  9.78      A
ATOM    471  C   LEU A  64      17.168  36.569  38.197  1.00 10.06      A
ATOM    472  O   LEU A  64      16.712  35.465  38.508  1.00 11.86      A
ATOM    473  N   THR A  65      17.120  37.614  39.012  1.00  6.99      A
ATOM    474  CA  THR A  65      16.503  37.481  40.334  1.00 11.54      A
ATOM    475  CB  THR A  65      17.097  38.472  41.341  1.00 13.33      A
ATOM    476  OG1 THR A  65      16.736  39.811  40.952  1.00 13.29      A
ATOM    477  CG2 THR A  65      18.644  38.331  41.395  1.00 11.42      A
ATOM    478  C   THR A  65      15.009  37.751  40.239  1.00 13.06      A
ATOM    479  O   THR A  65      14.530  38.268  39.233  1.00  9.78      A
ATOM    480  N   ALA A  66      14.272  37.374  41.281  1.00 11.93      A
ATOM    481  CA  ALA A  66      12.831  37.607  41.287  1.00 16.82      A
ATOM    482  CB  ALA A  66      12.231  37.106  42.601  1.00 17.23      A
ATOM    483  C   ALA A  66      12.527  39.104  41.105  1.00 14.69      A
ATOM    484  O   ALA A  66      11.587  39.467  40.409  1.00 12.67      A
ATOM    485  N   SER A  67      13.322  39.962  41.744  1.00 15.98      A
ATOM    486  CA  SER A  67      13.150  41.417  41.640  1.00 12.48      A
ATOM    487  CB  SER A  67      14.108  42.166  42.579  1.00 18.87      A
ATOM    488  OG  SER A  67      13.662  42.081  43.921  1.00 28.18      A
ATOM    489  C   SER A  67      13.403  41.890  40.212  1.00 12.05      A
ATOM    490  O   SER A  67      12.630  42.671  39.666  1.00 12.31      A
ATOM    491  N   GLN A  68      14.495  41.426  39.616  1.00  8.93      A
ATOM    492  CA  GLN A  68      14.796  41.803  38.237  1.00  8.58      A
ATOM    493  CB  GLN A  68      16.123  41.176  37.768  1.00 11.33      A
ATOM    494  CG  GLN A  68      17.343  41.749  38.524  1.00 12.20      A
ATOM    495  CD  GLN A  68      18.656  41.026  38.242  1.00 15.53      A
ATOM    496  OE1 GLN A  68      18.690  39.815  38.034  1.00 11.56      A
ATOM    497  NE2 GLN A  68      19.743  41.770  38.255  1.00 14.33      A
ATOM    498  C   GLN A  68      13.673  41.385  37.290  1.00 12.61      A
ATOM    499  O   GLN A  68      13.270  42.158  36.423  1.00 10.84      A
ATOM    500  N   LEU A  69      13.163  40.164  37.455  1.00 13.81      A
ATOM    501  CA  LEU A  69      12.093  39.687  36.576  1.00 13.47      A
ATOM    502  CB  LEU A  69      11.809  38.189  36.829  1.00 13.08      A
ATOM    503  CG  LEU A  69      12.989  37.268  36.496  1.00 14.83      A
ATOM    504  CD1 LEU A  69      12.772  35.862  37.071  1.00 16.18      A
ATOM    505  CD2 LEU A  69      13.140  37.233  34.981  1.00 11.50      A
ATOM    506  C   LEU A  69      10.810  40.484  36.778  1.00 13.14      A
ATOM    507  O   LEU A  69      10.138  40.860  35.814  1.00 13.07      A
ATOM    508  N   ALA A  70      10.465  40.728  38.034  1.00 12.61      A
ATOM    509  CA  ALA A  70       9.227  41.443  38.328  1.00 12.01      A
ATOM    510  CB  ALA A  70       8.951  41.453  39.841  1.00 13.19      A
ATOM    511  C   ALA A  70       9.275  42.852  37.785  1.00 12.44      A
ATOM    512  O   ALA A  70       8.297  43.334  37.240  1.00 16.48      A
ATOM    513  N   THR A  71      10.419  43.512  37.928  1.00 12.49      A
ATOM    514  CA  THR A  71      10.574  44.865  37.436  1.00 11.47      A
ATOM    515  CB  THR A  71      11.914  45.463  37.941  1.00 18.09      A
ATOM    516  OG1 THR A  71      11.834  45.621  39.370  1.00 19.27      A
ATOM    517  CG2 THR A  71      12.225  46.811  37.267  1.00 13.43      A
ATOM    518  C   THR A  71      10.501  44.905  35.902  1.00 11.57      A
ATOM    519  O   THR A  71       9.881  45.800  35.337  1.00 15.24      A
ATOM    520  N   TYR A  72      11.116  43.941  35.223  1.00 13.13      A
ATOM    521  CA  TYR A  72      11.049  43.941  33.760  1.00 12.95      A
ATOM    522  CB  TYR A  72      11.927  42.839  33.174  1.00 11.21      A
ATOM    523  CG  TYR A  72      12.194  43.011  31.682  1.00 12.14      A
ATOM    524  CD1 TYR A  72      13.122  43.936  31.224  1.00 11.17      A
ATOM    525  CE1 TYR A  72      13.376  44.101  29.841  1.00 11.35      A
ATOM    526  CD2 TYR A  72      11.515  42.239  30.736  1.00 14.03      A
ATOM    527  CE2 TYR A  72      11.765  42.378  29.372  1.00  8.40      A
```

FIGURE 5 (suite)

```
ATOM    528  CZ  TYR A  72      12.689  43.303  28.928  1.00 10.19      A
ATOM    529  OH  TYR A  72      12.949  43.425  27.585  1.00 10.75      A
ATOM    530  C   TYR A  72       9.604  43.705  33.313  1.00 13.42      A
ATOM    531  O   TYR A  72       9.111  44.346  32.394  1.00 14.74      A
ATOM    532  N   ALA A  73       8.943  42.763  33.970  1.00 14.68      A
ATOM    533  CA  ALA A  73       7.563  42.423  33.650  1.00 15.37      A
ATOM    534  CB  ALA A  73       7.090  41.293  34.556  1.00 10.74      A
ATOM    535  C   ALA A  73       6.631  43.626  33.791  1.00 14.04      A
ATOM    536  O   ALA A  73       5.711  43.811  32.992  1.00 13.32      A
ATOM    537  N   ALA A  74       6.856  44.436  34.815  1.00 16.88      A
ATOM    538  CA  ALA A  74       6.006  45.602  35.032  1.00 17.08      A
ATOM    539  CB  ALA A  74       6.082  46.052  36.505  1.00 13.94      A
ATOM    540  C   ALA A  74       6.354  46.768  34.118  1.00 20.94      A
ATOM    541  O   ALA A  74       5.475  47.357  33.476  1.00 17.04      A
ATOM    542  N   ASN A  75       7.645  47.061  34.014  1.00 15.74      A
ATOM    543  CA  ASN A  75       8.125  48.203  33.241  1.00 17.76      A
ATOM    544  CB  ASN A  75       9.439  48.712  33.839  1.00 19.52      A
ATOM    545  CG  ASN A  75       9.308  49.152  35.289  1.00 24.86      A
ATOM    546  OD1 ASN A  75      10.308  49.485  35.929  1.00 26.13      A
ATOM    547  ND2 ASN A  75       8.084  49.150  35.816  1.00 27.41      A
ATOM    548  C   ASN A  75       8.356  48.070  31.741  1.00 18.90      A
ATOM    549  O   ASN A  75       8.049  48.996  30.986  1.00 16.37      A
ATOM    550  N   LYS A  76       8.910  46.944  31.304  1.00 13.20      A
ATOM    551  CA  LYS A  76       9.235  46.810  29.888  1.00 14.05      A
ATOM    552  CB  LYS A  76      10.709  46.412  29.730  1.00 11.81      A
ATOM    553  CG  LYS A  76      11.706  47.189  30.561  1.00 15.12      A
ATOM    554  CD  LYS A  76      11.710  48.673  30.208  1.00 18.17      A
ATOM    555  CE  LYS A  76      12.942  49.342  30.783  1.00 21.75      A
ATOM    556  NZ  LYS A  76      12.858  50.832  30.665  1.00 23.76      A
ATOM    557  C   LYS A  76       8.414  45.835  29.064  1.00 14.89      A
ATOM    558  O   LYS A  76       8.184  46.053  27.874  1.00 15.18      A
ATOM    559  N   GLN A  77       7.996  44.746  29.686  1.00 13.65      A
ATOM    560  CA  GLN A  77       7.240  43.718  28.978  1.00 15.70      A
ATOM    561  CB  GLN A  77       6.865  42.625  29.964  1.00 14.98      A
ATOM    562  CG  GLN A  77       6.139  41.438  29.381  1.00 18.91      A
ATOM    563  CD  GLN A  77       5.848  40.392  30.441  1.00 26.71      A
ATOM    564  OE1 GLN A  77       6.747  39.965  31.167  1.00 25.14      A
ATOM    565  NE2 GLN A  77       4.593  39.968  30.534  1.00 21.79      A
ATOM    566  C   GLN A  77       5.989  44.205  28.222  1.00 16.81      A
ATOM    567  O   GLN A  77       5.718  43.746  27.114  1.00 17.54      A
ATOM    568  N   PRO A  78       5.216  45.142  28.800  1.00 19.48      A
ATOM    569  CD  PRO A  78       5.255  45.765  30.134  1.00 12.68      A
ATOM    570  CA  PRO A  78       4.023  45.575  28.056  1.00 15.54      A
ATOM    571  CB  PRO A  78       3.428  46.654  28.958  1.00 19.25      A
ATOM    572  CG  PRO A  78       3.787  46.150  30.342  1.00 17.82      A
ATOM    573  C   PRO A  78       4.325  46.080  26.646  1.00 20.10      A
ATOM    574  O   PRO A  78       3.614  45.748  25.692  1.00 18.30      A
ATOM    575  N   GLY A  79       5.393  46.860  26.512  1.00 15.27      A
ATOM    576  CA  GLY A  79       5.745  47.379  25.210  1.00 17.02      A
ATOM    577  C   GLY A  79       6.802  46.616  24.427  1.00 20.02      A
ATOM    578  O   GLY A  79       6.839  46.731  23.199  1.00 15.38      A
ATOM    579  N   TRP A  80       7.639  45.830  25.111  1.00 13.75      A
ATOM    580  CA  TRP A  80       8.723  45.092  24.440  1.00 14.43      A
ATOM    581  CB  TRP A  80      10.062  45.359  25.136  1.00 11.39      A
ATOM    582  CG  TRP A  80      10.549  46.780  25.071  1.00 15.13      A
ATOM    583  CD2 TRP A  80      11.672  47.329  25.767  1.00 13.37      A
ATOM    584  CE2 TRP A  80      11.823  48.666  25.332  1.00 13.52      A
ATOM    585  CE3 TRP A  80      12.573  46.817  26.716  1.00 12.51      A
ATOM    586  CD1 TRP A  80      10.068  47.779  24.271  1.00 19.04      A
ATOM    587  NE1 TRP A  80      10.831  48.919  24.418  1.00 16.58      A
ATOM    588  CZ2 TRP A  80      12.840  49.502  25.812  1.00 15.28      A
ATOM    589  CZ3 TRP A  80      13.586  47.645  27.197  1.00 13.05      A
ATOM    590  CH2 TRP A  80      13.710  48.979  26.739  1.00 16.82      A
ATOM    591  C   TRP A  80       8.560  43.580  24.349  1.00 16.83      A
ATOM    592  O   TRP A  80       9.361  42.909  23.685  1.00 16.92      A
ATOM    593  N   GLY A  81       7.562  43.031  25.033  1.00 15.56      A
ATOM    594  CA  GLY A  81       7.380  41.584  25.001  1.00 11.72      A
ATOM    595  C   GLY A  81       8.071  40.921  26.186  1.00 13.05      A
ATOM    596  O   GLY A  81       8.856  41.557  26.894  1.00  8.85      A
ATOM    597  N   LYS A  82       7.784  39.638  26.395  1.00 10.46      A
ATOM    598  CA  LYS A  82       8.374  38.882  27.499  1.00 11.96      A
ATOM    599  CB  LYS A  82       7.702  37.506  27.608  1.00 11.82      A
ATOM    600  CG  LYS A  82       6.341  37.497  28.315  1.00 12.27      A
ATOM    601  CD  LYS A  82       5.578  36.167  28.137  1.00 15.83      A
ATOM    602  CE  LYS A  82       6.296  34.971  28.782  1.00 21.44      A
ATOM    603  NZ  LYS A  82       6.571  35.179  30.234  1.00 18.30      A
```

FIGURE 5 (suite)

ATOM	604	C	LYS	A	82	9.868	38.658	27.275	1.00	12.45	A
ATOM	605	O	LYS	A	82	10.313	38.530	26.126	1.00	11.99	A
ATOM	606	N	LEU	A	83	10.649	38.598	28.357	1.00	10.87	A
ATOM	607	CA	LEU	A	83	12.057	38.305	28.161	1.00	10.47	A
ATOM	608	CB	LEU	A	83	12.955	38.929	29.248	1.00	16.59	A
ATOM	609	CG	LEU	A	83	13.059	38.501	30.707	1.00	13.98	A
ATOM	610	CD1	LEU	A	83	13.627	37.083	30.856	1.00	13.97	A
ATOM	611	CD2	LEU	A	83	14.010	39.508	31.412	1.00	12.95	A
ATOM	612	C	LEU	A	83	12.191	36.790	28.142	1.00	8.84	A
ATOM	613	O	LEU	A	83	11.288	36.062	28.604	1.00	12.14	A
ATOM	614	N	ILE	A	84	13.294	36.330	27.567	1.00	9.04	A
ATOM	615	CA	ILE	A	84	13.606	34.912	27.467	1.00	7.94	A
ATOM	616	CB	ILE	A	84	13.734	34.492	25.986	1.00	11.27	A
ATOM	617	CG2	ILE	A	84	14.322	33.075	25.875	1.00	15.02	A
ATOM	618	CG1	ILE	A	84	12.356	34.567	25.306	1.00	13.46	A
ATOM	619	CD1	ILE	A	84	12.407	34.310	23.806	1.00	10.66	A
ATOM	620	C	ILE	A	84	14.957	34.682	28.151	1.00	9.44	A
ATOM	621	O	ILE	A	84	15.918	35.410	27.891	1.00	9.33	A
ATOM	622	N	GLU	A	85	15.018	33.686	29.023	1.00	7.70	A
ATOM	623	CA	GLU	A	85	16.269	33.331	29.683	1.00	8.79	A
ATOM	624	CB	GLU	A	85	16.211	33.631	31.196	1.00	7.98	A
ATOM	625	CG	GLU	A	85	17.532	33.291	31.922	1.00	8.35	A
ATOM	626	CD	GLU	A	85	17.472	33.466	33.442	1.00	9.44	A
ATOM	627	OE1	GLU	A	85	16.520	32.969	34.103	1.00	13.35	A
ATOM	628	OE2	GLU	A	85	18.408	34.077	33.998	1.00	10.18	A
ATOM	629	C	GLU	A	85	16.452	31.832	29.442	1.00	9.15	A
ATOM	630	O	GLU	A	85	15.614	31.047	29.870	1.00	10.73	A
ATOM	631	N	VAL	A	86	17.513	31.438	28.733	1.00	9.15	A
ATOM	632	CA	VAL	A	86	17.772	30.021	28.458	1.00	9.61	A
ATOM	633	CB	VAL	A	86	17.394	29.631	26.987	1.00	8.48	A
ATOM	634	CG1	VAL	A	86	15.866	29.641	26.795	1.00	11.82	A
ATOM	635	CG2	VAL	A	86	18.062	30.587	25.998	1.00	8.25	A
ATOM	636	C	VAL	A	86	19.247	29.653	28.653	1.00	12.36	A
ATOM	637	O	VAL	A	86	20.135	30.490	28.488	1.00	7.65	A
ATOM	638	N	PRO	A	87	19.530	28.392	29.034	1.00	7.50	A
ATOM	639	CD	PRO	A	87	18.611	27.261	29.245	1.00	11.19	A
ATOM	640	CA	PRO	A	87	20.927	27.986	29.213	1.00	8.03	A
ATOM	641	CB	PRO	A	87	20.806	26.551	29.747	1.00	11.47	A
ATOM	642	CG	PRO	A	87	19.531	26.065	29.123	1.00	18.08	A
ATOM	643	C	PRO	A	87	21.551	28.031	27.803	1.00	12.05	A
ATOM	644	O	PRO	A	87	20.845	27.799	26.798	1.00	11.64	A
ATOM	645	N	SER	A	88	22.844	28.346	27.739	1.00	10.05	A
ATOM	646	CA	SER	A	88	23.607	28.427	26.480	1.00	8.91	A
ATOM	647	CB	SER	A	88	24.472	29.695	26.471	1.00	6.92	A
ATOM	648	OG	SER	A	88	25.266	29.787	25.294	1.00	11.36	A
ATOM	649	C	SER	A	88	24.484	27.177	26.379	1.00	7.85	A
ATOM	650	O	SER	A	88	24.385	26.432	25.401	1.00	7.71	A
ATOM	651	N	VAL	A	89	25.365	26.993	27.368	1.00	7.73	A
ATOM	652	CA	VAL	A	89	26.218	25.802	27.481	1.00	8.66	A
ATOM	653	CB	VAL	A	89	27.639	26.010	26.874	1.00	5.11	A
ATOM	654	CG1	VAL	A	89	27.522	26.503	25.400	1.00	7.72	A
ATOM	655	CG2	VAL	A	89	28.444	27.016	27.744	1.00	8.02	A
ATOM	656	C	VAL	A	89	26.407	25.527	28.980	1.00	10.90	A
ATOM	657	O	VAL	A	89	26.037	26.356	29.809	1.00	9.82	A
ATOM	658	N	ALA	A	90	26.982	24.369	29.325	1.00	10.64	A
ATOM	659	CA	ALA	A	90	27.242	24.059	30.722	1.00	8.29	A
ATOM	660	CB	ALA	A	90	26.792	22.616	31.077	1.00	8.16	A
ATOM	661	C	ALA	A	90	28.764	24.190	30.863	1.00	7.63	A
ATOM	662	O	ALA	A	90	29.498	24.095	29.880	1.00	7.66	A
ATOM	663	N	THR	A	91	29.233	24.345	32.091	1.00	7.77	A
ATOM	664	CA	THR	A	91	30.651	24.559	32.300	1.00	9.18	A
ATOM	665	CB	THR	A	91	30.945	26.074	32.165	1.00	10.09	A
ATOM	666	OG1	THR	A	91	32.337	26.323	32.365	1.00	11.79	A
ATOM	667	CG2	THR	A	91	30.156	26.862	33.214	1.00	11.41	A
ATOM	668	C	THR	A	91	31.116	24.140	33.686	1.00	10.91	A
ATOM	669	O	THR	A	91	30.326	24.055	34.614	1.00	9.96	A
ATOM	670	N	SER	A	92	32.409	23.858	33.811	1.00	11.52	A
ATOM	671	CA	SER	A	92	32.972	23.598	35.122	1.00	9.75	A
ATOM	672	CB	SER	A	92	34.167	22.642	35.011	1.00	12.03	A
ATOM	673	OG	SER	A	92	35.213	23.181	34.186	1.00	10.62	A
ATOM	674	C	SER	A	92	33.490	24.962	35.601	1.00	10.73	A
ATOM	675	O	SER	A	92	33.397	25.974	34.883	1.00	8.53	A
ATOM	676	N	VAL	A	93	33.980	25.003	36.837	1.00	8.68	A
ATOM	677	CA	VAL	A	93	34.640	26.197	37.369	1.00	7.08	A
ATOM	678	CB	VAL	A	93	34.010	26.736	38.667	1.00	7.09	A
ATOM	679	CG1	VAL	A	93	34.896	27.906	39.215	1.00	10.40	A

FIGURE 5 (suite)

```
ATOM    680  CG2 VAL A  93      32.592  27.269  38.376  1.00 10.45      A
ATOM    681  C   VAL A  93      36.033  25.643  37.694  1.00  9.49      A
ATOM    682  O   VAL A  93      36.162  24.745  38.527  1.00 12.26      A
ATOM    683  N   ALA A  94      37.064  26.148  37.025  1.00  8.00      A
ATOM    684  CA  ALA A  94      38.425  25.645  37.236  1.00  8.64      A
ATOM    685  CB  ALA A  94      39.204  25.722  35.921  1.00  7.88      A
ATOM    686  C   ALA A  94      39.197  26.374  38.329  1.00  7.97      A
ATOM    687  O   ALA A  94      38.906  27.530  38.625  1.00  8.61      A
ATOM    688  N   ILE A  95      40.210  25.709  38.894  1.00  5.77      A
ATOM    689  CA  ILE A  95      41.016  26.290  39.963  1.00  7.30      A
ATOM    690  CB  ILE A  95      40.870  25.486  41.307  1.00  9.66      A
ATOM    691  CG2 ILE A  95      41.522  26.261  42.465  1.00  6.29      A
ATOM    692  CG1 ILE A  95      39.401  25.218  41.641  1.00 10.13      A
ATOM    693  CD1 ILE A  95      38.566  26.491  41.909  1.00 13.60      A
ATOM    694  C   ILE A  95      42.496  26.263  39.572  1.00  8.10      A
ATOM    695  O   ILE A  95      43.261  25.373  40.001  1.00 10.23      A
ATOM    696  N   PRO A  96      42.923  27.216  38.742  1.00  6.65      A
ATOM    697  CD  PRO A  96      42.133  28.263  38.063  1.00  6.16      A
ATOM    698  CA  PRO A  96      44.330  27.265  38.326  1.00  7.43      A
ATOM    699  CB  PRO A  96      44.275  28.107  37.054  1.00  9.06      A
ATOM    700  CG  PRO A  96      43.207  29.147  37.446  1.00  8.84      A
ATOM    701  C   PRO A  96      45.133  27.938  39.434  1.00 10.94      A
ATOM    702  O   PRO A  96      44.574  28.645  40.277  1.00  8.21      A
ATOM    703  N   PHE A  97      46.441  27.715  39.447  1.00  9.05      A
ATOM    704  CA  PHE A  97      47.276  28.302  40.480  1.00  8.97      A
ATOM    705  CB  PHE A  97      47.259  27.414  41.732  1.00 10.70      A
ATOM    706  CG  PHE A  97      47.748  26.015  41.477  1.00  9.86      A
ATOM    707  CD1 PHE A  97      49.114  25.720  41.524  1.00 10.13      A
ATOM    708  CD2 PHE A  97      46.862  25.010  41.121  1.00  7.97      A
ATOM    709  CE1 PHE A  97      49.589  24.436  41.211  1.00  9.97      A
ATOM    710  CE2 PHE A  97      47.326  23.704  40.802  1.00  8.94      A
ATOM    711  CZ  PHE A  97      48.709  23.433  40.852  1.00  7.63      A
ATOM    712  C   PHE A  97      48.698  28.418  39.949  1.00  9.55      A
ATOM    713  O   PHE A  97      49.054  27.761  38.962  1.00  9.51      A
ATOM    714  N   ARG A  98      49.498  29.260  40.597  1.00  8.26      A
ATOM    715  CA  ARG A  98      50.900  29.457  40.205  1.00 11.26      A
ATOM    716  CB  ARG A  98      51.149  30.927  39.808  1.00 13.41      A
ATOM    717  CG  ARG A  98      52.624  31.218  39.452  1.00 12.41      A
ATOM    718  CD  ARG A  98      52.902  32.648  39.002  1.00 15.00      A
ATOM    719  NE  ARG A  98      54.350  32.871  38.907  1.00 20.95      A
ATOM    720  CZ  ARG A  98      55.048  33.714  39.670  1.00 19.61      A
ATOM    721  NH1 ARG A  98      54.454  34.446  40.606  1.00 16.05      A
ATOM    722  NH2 ARG A  98      56.361  33.824  39.500  1.00 22.95      A
ATOM    723  C   ARG A  98      51.765  29.079  41.415  1.00  9.82      A
ATOM    724  O   ARG A  98      51.955  29.881  42.327  1.00 12.72      A
ATOM    725  N   LYS A  99      52.258  27.838  41.417  1.00 13.72      A
ATOM    726  CA  LYS A  99      53.081  27.314  42.510  1.00 14.88      A
ATOM    727  CB  LYS A  99      52.179  26.922  43.688  1.00 10.80      A
ATOM    728  CG  LYS A  99      52.899  26.401  44.919  1.00  8.32      A
ATOM    729  CD  LYS A  99      53.744  27.518  45.557  1.00 10.62      A
ATOM    730  CE  LYS A  99      54.525  27.007  46.790  1.00 10.76      A
ATOM    731  NZ  LYS A  99      55.346  28.125  47.368  1.00 13.56      A
ATOM    732  C   LYS A  99      53.809  26.095  41.956  1.00 14.43      A
ATOM    733  O   LYS A  99      53.200  25.056  41.701  1.00 15.34      A
ATOM    734  N   ALA A 100      55.120  26.226  41.769  1.00 12.67      A
ATOM    735  CA  ALA A 100      55.911  25.143  41.202  1.00 14.53      A
ATOM    736  CB  ALA A 100      57.354  25.629  40.914  1.00 14.12      A
ATOM    737  C   ALA A 100      55.960  23.900  42.072  1.00 14.42      A
ATOM    738  O   ALA A 100      55.929  23.987  43.303  1.00 16.53      A
ATOM    739  N   GLY A 101      56.061  22.751  41.409  1.00 10.16      A
ATOM    740  CA  GLY A 101      56.133  21.476  42.096  1.00 11.78      A
ATOM    741  C   GLY A 101      55.786  20.360  41.136  1.00 17.78      A
ATOM    742  O   GLY A 101      54.853  20.479  40.338  1.00 14.78      A
ATOM    743  N   GLY A 102      56.543  19.274  41.195  1.00 13.81      A
ATOM    744  CA  GLY A 102      56.273  18.156  40.313  1.00 20.81      A
ATOM    745  C   GLY A 102      55.051  17.348  40.720  1.00 16.58      A
ATOM    746  O   GLY A 102      54.498  16.627  39.898  1.00 16.24      A
ATOM    747  N   ASN A 103      54.624  17.451  41.976  1.00 17.72      A
ATOM    748  CA  ASN A 103      53.465  16.675  42.434  1.00 16.85      A
ATOM    749  CB  ASN A 103      53.372  16.694  43.963  1.00 15.22      A
ATOM    750  CG  ASN A 103      54.365  15.760  44.615  1.00 23.02      A
ATOM    751  OD1 ASN A 103      55.279  15.249  43.955  1.00 19.32      A
ATOM    752  ND2 ASN A 103      54.205  15.535  45.916  1.00 15.75      A
ATOM    753  C   ASN A 103      52.145  17.197  41.885  1.00 15.38      A
ATOM    754  O   ASN A 103      51.991  18.390  41.666  1.00 11.02      A
ATOM    755  N   ALA A 104      51.183  16.306  41.693  1.00 16.02      A
```

FIGURE 5 (suite)

ATOM	756	CA	ALA	A	104	49.880	16.744	41.219	1.00	16.65	A
ATOM	757	CB	ALA	A	104	49.068	15.538	40.741	1.00	20.27	A
ATOM	758	C	ALA	A	104	49.170	17.427	42.395	1.00	15.98	A
ATOM	759	O	ALA	A	104	49.298	16.986	43.531	1.00	15.25	A
ATOM	760	N	VAL	A	105	48.470	18.530	42.127	1.00	13.62	A
ATOM	761	CA	VAL	A	105	47.701	19.227	43.157	1.00	13.77	A
ATOM	762	CB	VAL	A	105	47.708	20.756	42.945	1.00	15.80	A
ATOM	763	CG1	VAL	A	105	46.645	21.409	43.814	1.00	16.24	A
ATOM	764	CG2	VAL	A	105	49.081	21.310	43.295	1.00	15.48	A
ATOM	765	C	VAL	A	105	46.273	18.699	43.026	1.00	13.93	A
ATOM	766	O	VAL	A	105	45.634	18.867	41.982	1.00	11.00	A
ATOM	767	N	ASP	A	106	45.781	18.059	44.085	1.00	11.30	A
ATOM	768	CA	ASP	A	106	44.446	17.447	44.087	1.00	13.33	A
ATOM	769	CB	ASP	A	106	44.594	15.914	44.007	1.00	15.23	A
ATOM	770	CG	ASP	A	106	43.266	15.181	43.763	1.00	18.75	A
ATOM	771	OD1	ASP	A	106	43.294	13.932	43.636	1.00	20.08	A
ATOM	772	OD2	ASP	A	106	42.201	15.832	43.705	1.00	16.37	A
ATOM	773	C	ASP	A	106	43.748	17.854	45.371	1.00	13.44	A
ATOM	774	O	ASP	A	106	44.013	17.312	46.441	1.00	12.47	A
ATOM	775	N	LEU	A	107	42.838	18.809	45.256	1.00	12.47	A
ATOM	776	CA	LEU	A	107	42.126	19.322	46.424	1.00	10.60	A
ATOM	777	CB	LEU	A	107	41.608	20.743	46.139	1.00	9.94	A
ATOM	778	CG	LEU	A	107	42.656	21.830	45.874	1.00	15.11	A
ATOM	779	CD1	LEU	A	107	41.992	23.049	45.233	1.00	12.77	A
ATOM	780	CD2	LEU	A	107	43.332	22.222	47.191	1.00	15.50	A
ATOM	781	C	LEU	A	107	40.936	18.504	46.860	1.00	11.58	A
ATOM	782	O	LEU	A	107	40.118	18.134	46.029	1.00	11.26	A
ATOM	783	N	SER	A	108	40.840	18.205	48.157	1.00	10.03	A
ATOM	784	CA	SER	A	108	39.632	17.555	48.632	1.00	9.49	A
ATOM	785	CB	SER	A	108	39.823	16.938	50.026	1.00	11.45	A
ATOM	786	OG	SER	A	108	40.112	17.944	50.988	1.00	10.62	A
ATOM	787	C	SER	A	108	38.686	18.762	48.734	1.00	13.88	A
ATOM	788	O	SER	A	108	39.137	19.909	48.733	1.00	9.31	A
ATOM	789	N	VAL	A	109	37.384	18.528	48.795	1.00	11.62	A
ATOM	790	CA	VAL	A	109	36.456	19.648	48.915	1.00	12.52	A
ATOM	791	CB	VAL	A	109	34.997	19.149	48.822	1.00	14.25	A
ATOM	792	CG1	VAL	A	109	34.022	20.273	49.172	1.00	10.43	A
ATOM	793	CG2	VAL	A	109	34.738	18.624	47.385	1.00	9.95	A
ATOM	794	C	VAL	A	109	36.705	20.397	50.228	1.00	8.60	A
ATOM	795	O	VAL	A	109	36.646	21.622	50.265	1.00	9.21	A
ATOM	796	N	LYS	A	110	36.995	19.666	51.301	1.00	9.28	A
ATOM	797	CA	LYS	A	110	37.307	20.306	52.593	1.00	7.04	A
ATOM	798	CB	LYS	A	110	37.597	19.237	53.650	1.00	7.60	A
ATOM	799	CG	LYS	A	110	38.038	19.793	55.030	1.00	9.51	A
ATOM	800	CD	LYS	A	110	36.987	20.726	55.655	1.00	7.71	A
ATOM	801	CE	LYS	A	110	37.436	21.170	57.033	1.00	15.09	A
ATOM	802	NZ	LYS	A	110	36.482	22.129	57.688	1.00	11.10	A
ATOM	803	C	LYS	A	110	38.532	21.234	52.452	1.00	8.55	A
ATOM	804	O	LYS	A	110	38.588	22.313	53.040	1.00	9.65	A
ATOM	805	N	GLU	A	111	39.530	20.803	51.696	1.00	8.56	A
ATOM	806	CA	GLU	A	111	40.711	21.640	51.495	1.00	11.39	A
ATOM	807	CB	GLU	A	111	41.817	20.836	50.800	1.00	13.45	A
ATOM	808	CG	GLU	A	111	42.582	19.940	51.784	1.00	15.25	A
ATOM	809	CD	GLU	A	111	43.527	18.960	51.098	1.00	16.99	A
ATOM	810	OE1	GLU	A	111	44.310	18.296	51.808	1.00	12.70	A
ATOM	811	OE2	GLU	A	111	43.477	18.851	49.860	1.00	13.80	A
ATOM	812	C	GLU	A	111	40.342	22.881	50.663	1.00	12.16	A
ATOM	813	O	GLU	A	111	40.751	23.998	50.983	1.00	8.45	A
ATOM	814	N	LEU	A	112	39.586	22.680	49.587	1.00	11.50	A
ATOM	815	CA	LEU	A	112	39.157	23.802	48.753	1.00	11.60	A
ATOM	816	CB	LEU	A	112	38.127	23.339	47.728	1.00	12.29	A
ATOM	817	CG	LEU	A	112	37.520	24.486	46.906	1.00	13.68	A
ATOM	818	CD1	LEU	A	112	38.486	24.835	45.793	1.00	14.87	A
ATOM	819	CD2	LEU	A	112	36.183	24.067	46.307	1.00	23.81	A
ATOM	820	C	LEU	A	112	38.491	24.845	49.648	1.00	11.64	A
ATOM	821	O	LEU	A	112	38.782	26.036	49.569	1.00	9.35	A
ATOM	822	N	CYS	A	113	37.598	24.370	50.511	1.00	9.13	A
ATOM	823	CA	CYS	A	113	36.869	25.251	51.407	1.00	10.02	A
ATOM	824	C	CYS	A	113	37.806	26.040	52.332	1.00	10.42	A
ATOM	825	O	CYS	A	113	37.620	27.243	52.550	1.00	9.94	A
ATOM	826	CB	CYS	A	113	35.881	24.414	52.215	1.00	7.06	A
ATOM	827	SG	CYS	A	113	34.495	23.714	51.225	1.00	12.97	A
ATOM	828	N	GLY	A	114	38.815	25.357	52.854	1.00	8.53	A
ATOM	829	CA	GLY	A	114	39.774	25.979	53.746	1.00	8.15	A
ATOM	830	C	GLY	A	114	40.615	27.023	53.048	1.00	8.58	A
ATOM	831	O	GLY	A	114	40.974	28.045	53.660	1.00	9.42	A

FIGURE 5 (suite)

```
ATOM    832  N   VAL A 115      40.929  26.780  51.773  1.00  8.91      A
ATOM    833  CA  VAL A 115      41.724  27.727  51.001  1.00 11.99      A
ATOM    834  CB  VAL A 115      42.142  27.154  49.611  1.00 10.97      A
ATOM    835  CG1 VAL A 115      42.754  28.274  48.736  1.00 12.08      A
ATOM    836  CG2 VAL A 115      43.175  26.034  49.794  1.00  9.96      A
ATOM    837  C   VAL A 115      40.933  28.999  50.769  1.00 10.50      A
ATOM    838  O   VAL A 115      41.450  30.107  50.958  1.00 10.53      A
ATOM    839  N   PHE A 116      39.672  28.856  50.383  1.00 10.04      A
ATOM    840  CA  PHE A 116      38.885  30.046  50.123  1.00 12.53      A
ATOM    841  CB  PHE A 116      37.891  29.774  49.000  1.00  8.51      A
ATOM    842  CG  PHE A 116      38.564  29.656  47.664  1.00  8.77      A
ATOM    843  CD1 PHE A 116      39.041  28.429  47.220  1.00  7.52      A
ATOM    844  CD2 PHE A 116      38.792  30.791  46.892  1.00 10.79      A
ATOM    845  CE1 PHE A 116      39.742  28.319  46.019  1.00 11.26      A
ATOM    846  CE2 PHE A 116      39.494  30.708  45.682  1.00 12.98      A
ATOM    847  CZ  PHE A 116      39.971  29.463  45.244  1.00 12.19      A
ATOM    848  C   PHE A 116      38.236  30.713  51.319  1.00 11.72      A
ATOM    849  O   PHE A 116      37.688  31.802  51.180  1.00 10.01      A
ATOM    850  N   SER A 117      38.323  30.077  52.493  1.00  7.36      A
ATOM    851  CA  SER A 117      37.802  30.669  53.722  1.00 12.12      A
ATOM    852  CB  SER A 117      37.217  29.605  54.654  1.00 11.41      A
ATOM    853  OG  SER A 117      38.251  28.827  55.231  1.00 12.73      A
ATOM    854  C   SER A 117      38.935  31.372  54.474  1.00 12.93      A
ATOM    855  O   SER A 117      38.693  32.241  55.316  1.00  9.90      A
ATOM    856  N   GLY A 118      40.169  30.988  54.174  1.00 14.10      A
ATOM    857  CA  GLY A 118      41.312  31.576  54.860  1.00 13.07      A
ATOM    858  C   GLY A 118      41.850  30.640  55.931  1.00 15.32      A
ATOM    859  O   GLY A 118      42.935  30.873  56.484  1.00 15.65      A
ATOM    860  N   ARG A 119      41.107  29.575  56.241  1.00 15.32      A
ATOM    861  CA  ARG A 119      41.550  28.622  57.266  1.00 15.10      A
ATOM    862  CB  ARG A 119      40.503  27.518  57.485  1.00 17.52      A
ATOM    863  CG  ARG A 119      40.986  26.359  58.390  1.00 19.04      A
ATOM    864  CD  ARG A 119      39.880  25.325  58.628  1.00 17.23      A
ATOM    865  NE  ARG A 119      39.338  24.771  57.377  1.00 11.41      A
ATOM    866  CZ  ARG A 119      39.828  23.717  56.727  1.00 13.77      A
ATOM    867  NH1 ARG A 119      40.895  23.061  57.188  1.00  9.19      A
ATOM    868  NH2 ARG A 119      39.239  23.317  55.607  1.00 10.56      A
ATOM    869  C   ARG A 119      42.896  27.990  56.896  1.00 14.09      A
ATOM    870  O   ARG A 119      43.749  27.784  57.757  1.00 12.49      A
ATOM    871  N   ILE A 120      43.074  27.672  55.620  1.00 14.25      A
ATOM    872  CA  ILE A 120      44.327  27.088  55.134  1.00 11.87      A
ATOM    873  CB  ILE A 120      44.066  25.956  54.113  1.00 13.86      A
ATOM    874  CG2 ILE A 120      45.373  25.443  53.529  1.00 12.88      A
ATOM    875  CG1 ILE A 120      43.349  24.796  54.812  1.00 12.97      A
ATOM    876  CD1 ILE A 120      42.920  23.638  53.863  1.00 12.93      A
ATOM    877  C   ILE A 120      45.042  28.241  54.445  1.00 16.50      A
ATOM    878  O   ILE A 120      44.606  28.704  53.391  1.00 15.43      A
ATOM    879  N   ALA A 121      46.131  28.706  55.051  1.00 15.30      A
ATOM    880  CA  ALA A 121      46.884  29.848  54.529  1.00 14.70      A
ATOM    881  CB  ALA A 121      47.111  30.850  55.640  1.00 21.39      A
ATOM    882  C   ALA A 121      48.211  29.482  53.904  1.00 15.45      A
ATOM    883  O   ALA A 121      48.868  30.329  53.284  1.00 16.44      A
ATOM    884  N   ASN A 122      48.608  28.227  54.056  1.00 12.07      A
ATOM    885  CA  ASN A 122      49.887  27.789  53.507  1.00 12.53      A
ATOM    886  CB  ASN A 122      50.853  27.467  54.660  1.00 13.64      A
ATOM    887  CG  ASN A 122      52.279  27.293  54.188  1.00 16.68      A
ATOM    888  OD1 ASN A 122      52.666  26.224  53.725  1.00 18.01      A
ATOM    889  ND2 ASN A 122      53.063  28.363  54.279  1.00 14.68      A
ATOM    890  C   ASN A 122      49.681  26.568  52.608  1.00 11.32      A
ATOM    891  O   ASN A 122      48.809  25.737  52.865  1.00 11.94      A
ATOM    892  N   TRP A 123      50.454  26.499  51.528  1.00 12.38      A
ATOM    893  CA  TRP A 123      50.365  25.390  50.580  1.00 10.94      A
ATOM    894  CB  TRP A 123      51.330  25.597  49.406  1.00 10.33      A
ATOM    895  CG  TRP A 123      50.761  26.503  48.337  1.00 12.83      A
ATOM    896  CD2 TRP A 123      49.900  26.108  47.261  1.00 10.58      A
ATOM    897  CE2 TRP A 123      49.568  27.279  46.533  1.00 12.26      A
ATOM    898  CE3 TRP A 123      49.381  24.884  46.841  1.00 12.52      A
ATOM    899  CD1 TRP A 123      50.916  27.862  48.227  1.00 15.24      A
ATOM    900  NE1 TRP A 123      50.198  28.334  47.140  1.00 12.70      A
ATOM    901  CZ2 TRP A 123      48.732  27.256  45.403  1.00 10.92      A
ATOM    902  CZ3 TRP A 123      48.547  24.863  45.710  1.00 16.36      A
ATOM    903  CH2 TRP A 123      48.237  26.043  45.012  1.00  9.72      A
ATOM    904  C   TRP A 123      50.661  24.045  51.213  1.00 13.55      A
ATOM    905  O   TRP A 123      50.284  23.006  50.676  1.00 13.98      A
ATOM    906  N   SER A 124      51.346  24.054  52.349  1.00 13.10      A
ATOM    907  CA  SER A 124      51.654  22.801  53.010  1.00 11.36      A
```

FIGURE 5 (suite)

```
ATOM    908  CB  SER A 124      52.670  23.038  54.135  1.00 11.89      A
ATOM    909  OG  SER A 124      52.130  23.884  55.132  1.00 14.19      A
ATOM    910  C   SER A 124      50.361  22.161  53.564  1.00 17.25      A
ATOM    911  O   SER A 124      50.354  20.974  53.924  1.00 13.81      A
ATOM    912  N   GLY A 125      49.273  22.937  53.617  1.00 13.73      A
ATOM    913  CA  GLY A 125      47.999  22.416  54.117  1.00 13.26      A
ATOM    914  C   GLY A 125      47.216  21.569  53.101  1.00 19.05      A
ATOM    915  O   GLY A 125      46.116  21.066  53.404  1.00 15.82      A
ATOM    916  N   ILE A 126      47.759  21.413  51.892  1.00 11.57      A
ATOM    917  CA  ILE A 126      47.111  20.590  50.866  1.00 13.57      A
ATOM    918  CB  ILE A 126      47.116  21.338  49.499  1.00 10.65      A
ATOM    919  CG2 ILE A 126      46.584  20.440  48.369  1.00 10.73      A
ATOM    920  CG1 ILE A 126      46.244  22.598  49.639  1.00 14.04      A
ATOM    921  CD1 ILE A 126      46.355  23.571  48.474  1.00 21.47      A
ATOM    922  C   ILE A 126      47.886  19.270  50.794  1.00 14.42      A
ATOM    923  O   ILE A 126      49.012  19.228  50.299  1.00 12.48      A
ATOM    924  N   THR A 127      47.287  18.199  51.310  1.00 14.33      A
ATOM    925  CA  THR A 127      47.974  16.918  51.341  1.00 15.70      A
ATOM    926  CB  THR A 127      47.144  15.848  52.079  1.00 20.78      A
ATOM    927  OG1 THR A 127      45.978  15.519  51.309  1.00 21.71      A
ATOM    928  CG2 THR A 127      46.719  16.379  53.462  1.00 19.06      A
ATOM    929  C   THR A 127      48.389  16.389  49.978  1.00 15.85      A
ATOM    930  O   THR A 127      47.628  16.442  49.011  1.00 15.48      A
ATOM    931  N   GLY A 128      49.627  15.907  49.925  1.00 11.25      A
ATOM    932  CA  GLY A 128      50.202  15.348  48.719  1.00 13.92      A
ATOM    933  C   GLY A 128      50.726  16.299  47.655  1.00 15.93      A
ATOM    934  O   GLY A 128      51.360  15.837  46.718  1.00 18.28      A
ATOM    935  N   ALA A 129      50.491  17.610  47.788  1.00 13.36      A
ATOM    936  CA  ALA A 129      50.929  18.558  46.765  1.00 14.53      A
ATOM    937  CB  ALA A 129      50.138  19.873  46.886  1.00 13.51      A
ATOM    938  C   ALA A 129      52.428  18.856  46.777  1.00 20.08      A
ATOM    939  O   ALA A 129      52.954  19.427  45.811  1.00 13.92      A
ATOM    940  N   GLY A 130      53.110  18.489  47.863  1.00 15.72      A
ATOM    941  CA  GLY A 130      54.552  18.715  47.931  1.00 18.22      A
ATOM    942  C   GLY A 130      54.937  20.167  47.720  1.00 17.01      A
ATOM    943  O   GLY A 130      55.944  20.485  47.088  1.00 16.95      A
ATOM    944  N   ARG A 131      54.130  21.059  48.274  1.00 14.88      A
ATOM    945  CA  ARG A 131      54.361  22.500  48.142  1.00 14.67      A
ATOM    946  CB  ARG A 131      53.312  23.102  47.190  1.00 10.65      A
ATOM    947  CG  ARG A 131      53.506  22.713  45.730  1.00 14.78      A
ATOM    948  CD  ARG A 131      52.234  22.985  44.895  1.00 13.27      A
ATOM    949  NE  ARG A 131      52.479  22.959  43.441  1.00 13.40      A
ATOM    950  CZ  ARG A 131      52.670  21.873  42.695  1.00 12.12      A
ATOM    951  NH1 ARG A 131      52.880  22.010  41.383  1.00 12.83      A
ATOM    952  NH2 ARG A 131      52.656  20.660  43.233  1.00 13.76      A
ATOM    953  C   ARG A 131      54.217  23.171  49.502  1.00 14.12      A
ATOM    954  O   ARG A 131      53.451  22.703  50.329  1.00 15.12      A
ATOM    955  N   SER A 132      54.948  24.258  49.730  1.00 12.39      A
ATOM    956  CA  SER A 132      54.830  24.987  50.990  1.00 15.94      A
ATOM    957  CB  SER A 132      55.817  24.450  52.046  1.00 22.25      A
ATOM    958  OG  SER A 132      57.143  24.690  51.644  1.00 25.99      A
ATOM    959  C   SER A 132      55.070  26.468  50.735  1.00 12.92      A
ATOM    960  O   SER A 132      55.695  26.857  49.746  1.00 16.84      A
ATOM    961  N   GLY A 133      54.570  27.300  51.634  1.00 14.33      A
ATOM    962  CA  GLY A 133      54.695  28.734  51.442  1.00 14.73      A
ATOM    963  C   GLY A 133      53.295  29.318  51.394  1.00 14.56      A
ATOM    964  O   GLY A 133      52.320  28.589  51.183  1.00 12.31      A
ATOM    965  N   PRO A 134      53.162  30.633  51.561  1.00 15.09      A
ATOM    966  CD  PRO A 134      54.254  31.607  51.743  1.00 16.35      A
ATOM    967  CA  PRO A 134      51.854  31.291  51.548  1.00 14.55      A
ATOM    968  CB  PRO A 134      52.196  32.760  51.828  1.00 20.54      A
ATOM    969  CG  PRO A 134      53.623  32.900  51.266  1.00 21.58      A
ATOM    970  C   PRO A 134      50.997  31.143  50.299  1.00 16.29      A
ATOM    971  O   PRO A 134      51.509  31.105  49.180  1.00 12.69      A
ATOM    972  N   ILE A 135      49.685  31.057  50.527  1.00 13.39      A
ATOM    973  CA  ILE A 135      48.688  30.973  49.454  1.00 13.74      A
ATOM    974  CB  ILE A 135      47.523  30.010  49.801  1.00 15.95      A
ATOM    975  CG2 ILE A 135      46.417  30.115  48.727  1.00 13.97      A
ATOM    976  CG1 ILE A 135      48.032  28.582  49.918  1.00 15.73      A
ATOM    977  CD1 ILE A 135      46.988  27.607  50.453  1.00 15.61      A
ATOM    978  C   ILE A 135      48.077  32.366  49.353  1.00 13.04      A
ATOM    979  O   ILE A 135      47.757  32.983  50.372  1.00 15.69      A
ATOM    980  N   GLN A 136      47.918  32.872  48.136  1.00 11.91      A
ATOM    981  CA  GLN A 136      47.319  34.190  47.958  1.00 11.20      A
ATOM    982  CB  GLN A 136      48.317  35.145  47.306  1.00 12.71      A
ATOM    983  CG  GLN A 136      47.892  36.594  47.337  1.00 19.42      A
```

FIGURE 5 (suite)

```
ATOM    984  CD  GLN A 136      48.999  37.566  46.905  1.00 23.10      A
ATOM    985  OE1 GLN A 136      49.620  37.403  45.858  1.00 23.52      A
ATOM    986  NE2 GLN A 136      49.233  38.585  47.714  1.00 30.84      A
ATOM    987  C   GLN A 136      46.105  34.023  47.053  1.00  9.51      A
ATOM    988  O   GLN A 136      46.254  33.639  45.921  1.00  9.81      A
ATOM    989  N   VAL A 137      44.911  34.303  47.552  1.00  8.18      A
ATOM    990  CA  VAL A 137      43.717  34.161  46.733  1.00  4.96      A
ATOM    991  CB  VAL A 137      42.470  33.907  47.657  1.00  8.36      A
ATOM    992  CG1 VAL A 137      41.176  34.014  46.855  1.00  5.20      A
ATOM    993  CG2 VAL A 137      42.589  32.543  48.294  1.00 10.61      A
ATOM    994  C   VAL A 137      43.442  35.380  45.837  1.00  9.91      A
ATOM    995  O   VAL A 137      43.555  36.534  46.284  1.00  9.14      A
ATOM    996  N   VAL A 138      43.124  35.114  44.566  1.00  7.01      A
ATOM    997  CA  VAL A 138      42.735  36.134  43.600  1.00  8.67      A
ATOM    998  CB  VAL A 138      43.437  35.976  42.226  1.00  9.91      A
ATOM    999  CG1 VAL A 138      42.983  37.092  41.301  1.00 11.71      A
ATOM   1000  CG2 VAL A 138      44.947  36.068  42.394  1.00 18.67      A
ATOM   1001  C   VAL A 138      41.237  35.914  43.386  1.00  7.40      A
ATOM   1002  O   VAL A 138      40.791  34.775  43.196  1.00  7.75      A
ATOM   1003  N   TYR A 139      40.452  36.987  43.435  1.00  9.87      A
ATOM   1004  CA  TYR A 139      39.009  36.871  43.256  1.00  9.42      A
ATOM   1005  CB  TYR A 139      38.303  36.902  44.625  1.00  8.26      A
ATOM   1006  CG  TYR A 139      38.509  38.192  45.389  1.00  9.37      A
ATOM   1007  CD1 TYR A 139      37.570  39.211  45.322  1.00  8.61      A
ATOM   1008  CE1 TYR A 139      37.748  40.424  46.013  1.00  9.72      A
ATOM   1009  CD2 TYR A 139      39.659  38.397  46.177  1.00  9.71      A
ATOM   1010  CE2 TYR A 139      39.853  39.616  46.878  1.00 12.90      A
ATOM   1011  CZ  TYR A 139      38.890  40.623  46.786  1.00 15.66      A
ATOM   1012  OH  TYR A 139      39.045  41.829  47.459  1.00  8.23      A
ATOM   1013  C   TYR A 139      38.507  38.006  42.381  1.00  8.45      A
ATOM   1014  O   TYR A 139      39.246  38.947  42.099  1.00  8.15      A
ATOM   1015  N   ARG A 140      37.259  37.899  41.935  1.00  8.93      A
ATOM   1016  CA  ARG A 140      36.660  38.903  41.070  1.00  7.41      A
ATOM   1017  CB  ARG A 140      35.514  38.296  40.243  1.00 10.32      A
ATOM   1018  CG  ARG A 140      35.991  37.317  39.148  1.00  5.86      A
ATOM   1019  CD  ARG A 140      36.556  38.103  37.948  1.00  5.80      A
ATOM   1020  NE  ARG A 140      35.502  38.821  37.218  1.00  7.23      A
ATOM   1021  CZ  ARG A 140      34.659  38.232  36.376  1.00 11.87      A
ATOM   1022  NH1 ARG A 140      34.748  36.918  36.152  1.00  5.93      A
ATOM   1023  NH2 ARG A 140      33.715  38.952  35.769  1.00  8.31      A
ATOM   1024  C   ARG A 140      36.129  40.063  41.895  1.00  8.44      A
ATOM   1025  O   ARG A 140      35.327  39.896  42.832  1.00  8.91      A
ATOM   1026  N   ALA A 141      36.583  41.242  41.523  1.00  8.44      A
ATOM   1027  CA  ALA A 141      36.198  42.471  42.206  1.00  8.99      A
ATOM   1028  CB  ALA A 141      37.121  43.579  41.761  1.00 12.40      A
ATOM   1029  C   ALA A 141      34.748  42.895  41.975  1.00 11.15      A
ATOM   1030  O   ALA A 141      34.091  43.421  42.878  1.00  9.17      A
ATOM   1031  N   GLU A 142      34.258  42.679  40.765  1.00 10.41      A
ATOM   1032  CA  GLU A 142      32.912  43.110  40.401  1.00 11.28      A
ATOM   1033  CB  GLU A 142      32.944  43.735  38.995  1.00 11.17      A
ATOM   1034  CG  GLU A 142      32.968  42.720  37.800  1.00 16.02      A
ATOM   1035  CD  GLU A 142      34.319  41.984  37.551  1.00 14.71      A
ATOM   1036  OE1 GLU A 142      35.102  41.758  38.492  1.00 20.26      A
ATOM   1037  OE2 GLU A 142      34.582  41.608  36.382  1.00 15.07      A
ATOM   1038  C   GLU A 142      31.854  42.001  40.428  1.00 15.45      A
ATOM   1039  O   GLU A 142      32.160  40.827  40.689  1.00 11.17      A
ATOM   1040  N   VAL A 143      30.604  42.399  40.170  1.00 13.82      A
ATOM   1041  CA  VAL A 143      29.474  41.461  40.114  1.00 12.65      A
ATOM   1042  CB  VAL A 143      28.155  42.192  39.792  1.00 12.26      A
ATOM   1043  CG1 VAL A 143      27.052  41.196  39.668  1.00 17.81      A
ATOM   1044  CG2 VAL A 143      27.822  43.174  40.870  1.00 18.80      A
ATOM   1045  C   VAL A 143      29.770  40.456  38.996  1.00 12.06      A
ATOM   1046  O   VAL A 143      29.785  40.814  37.811  1.00 10.75      A
ATOM   1047  N   SER A 144      29.972  39.198  39.388  1.00 10.21      A
ATOM   1048  CA  SER A 144      30.352  38.119  38.462  1.00  6.60      A
ATOM   1049  CB  SER A 144      31.822  37.764  38.758  1.00  8.21      A
ATOM   1050  OG  SER A 144      32.188  36.468  38.328  1.00  8.64      A
ATOM   1051  C   SER A 144      29.499  36.834  38.512  1.00  7.57      A
ATOM   1052  O   SER A 144      29.166  36.346  39.601  1.00  8.05      A
ATOM   1053  N   GLY A 145      29.168  36.303  37.330  1.00  5.34      A
ATOM   1054  CA  GLY A 145      28.437  35.047  37.226  1.00  7.72      A
ATOM   1055  C   GLY A 145      29.335  33.884  37.638  1.00  7.84      A
ATOM   1056  O   GLY A 145      28.873  32.870  38.197  1.00  6.69      A
ATOM   1057  N   THR A 146      30.628  34.001  37.357  1.00  6.57      A
ATOM   1058  CA  THR A 146      31.574  32.953  37.758  1.00  6.39      A
ATOM   1059  CB  THR A 146      33.012  33.263  37.279  1.00  9.37      A
```

FIGURE 5 (suite)

ATOM	1060	OG1	THR	A	146	33.026	33.463	35.855	1.00	8.49	A
ATOM	1061	CG2	THR	A	146	33.928	32.087	37.613	1.00	11.25	A
ATOM	1062	C	THR	A	146	31.569	32.892	39.294	1.00	8.02	A
ATOM	1063	O	THR	A	146	31.601	31.802	39.888	1.00	8.00	A
ATOM	1064	N	THR	A	147	31.551	34.064	39.930	1.00	6.33	A
ATOM	1065	CA	THR	A	147	31.483	34.131	41.394	1.00	8.35	A
ATOM	1066	CB	THR	A	147	31.554	35.591	41.921	1.00	6.29	A
ATOM	1067	OG1	THR	A	147	32.834	36.161	41.624	1.00	7.92	A
ATOM	1068	CG2	THR	A	147	31.373	35.602	43.450	1.00	8.46	A
ATOM	1069	C	THR	A	147	30.175	33.486	41.885	1.00	5.86	A
ATOM	1070	O	THR	A	147	30.172	32.745	42.883	1.00	7.90	A
ATOM	1071	N	GLU	A	148	29.059	33.751	41.198	1.00	5.81	A
ATOM	1072	CA	GLU	A	148	27.786	33.131	41.592	1.00	5.50	A
ATOM	1073	CB	GLU	A	148	26.644	33.653	40.710	1.00	6.06	A
ATOM	1074	CG	GLU	A	148	25.284	33.004	41.058	1.00	10.99	A
ATOM	1075	CD	GLU	A	148	24.076	33.737	40.457	1.00	12.04	A
ATOM	1076	OE1	GLU	A	148	23.920	34.966	40.685	1.00	9.92	A
ATOM	1077	OE2	GLU	A	148	23.271	33.078	39.765	1.00	13.03	A
ATOM	1078	C	GLU	A	148	27.846	31.591	41.491	1.00	6.20	A
ATOM	1079	O	GLU	A	148	27.419	30.866	42.408	1.00	7.44	A
ATOM	1080	N	LEU	A	149	28.318	31.077	40.359	1.00	4.66	A
ATOM	1081	CA	LEU	A	149	28.442	29.616	40.196	1.00	6.87	A
ATOM	1082	CB	LEU	A	149	29.011	29.301	38.807	1.00	7.74	A
ATOM	1083	CG	LEU	A	149	28.105	29.569	37.591	1.00	8.75	A
ATOM	1084	CD1	LEU	A	149	28.878	29.218	36.342	1.00	10.50	A
ATOM	1085	CD2	LEU	A	149	26.804	28.721	37.678	1.00	9.52	A
ATOM	1086	C	LEU	A	149	29.376	28.980	41.254	1.00	7.07	A
ATOM	1087	O	LEU	A	149	29.127	27.865	41.754	1.00	7.65	A
ATOM	1088	N	PHE	A	150	30.473	29.670	41.568	1.00	8.71	A
ATOM	1089	CA	PHE	A	150	31.459	29.183	42.540	1.00	7.06	A
ATOM	1090	CB	PHE	A	150	32.752	30.021	42.427	1.00	6.97	A
ATOM	1091	CG	PHE	A	150	33.884	29.551	43.325	1.00	9.24	A
ATOM	1092	CD1	PHE	A	150	34.313	28.225	43.305	1.00	10.27	A
ATOM	1093	CD2	PHE	A	150	34.557	30.455	44.138	1.00	12.03	A
ATOM	1094	CE1	PHE	A	150	35.411	27.803	44.081	1.00	12.21	A
ATOM	1095	CE2	PHE	A	150	35.657	30.050	44.920	1.00	11.31	A
ATOM	1096	CZ	PHE	A	150	36.083	28.721	44.890	1.00	10.56	A
ATOM	1097	C	PHE	A	150	30.936	29.217	43.987	1.00	7.58	A
ATOM	1098	O	PHE	A	150	31.060	28.236	44.709	1.00	6.52	A
ATOM	1099	N	THR	A	151	30.350	30.334	44.409	1.00	7.57	A
ATOM	1100	CA	THR	A	151	29.836	30.437	45.770	1.00	8.97	A
ATOM	1101	CB	THR	A	151	29.548	31.938	46.193	1.00	9.78	A
ATOM	1102	OG1	THR	A	151	28.580	32.526	45.314	1.00	8.77	A
ATOM	1103	CG2	THR	A	151	30.826	32.744	46.152	1.00	7.96	A
ATOM	1104	C	THR	A	151	28.588	29.588	45.988	1.00	7.22	A
ATOM	1105	O	THR	A	151	28.274	29.245	47.131	1.00	7.49	A
ATOM	1106	N	ARG	A	152	27.873	29.229	44.916	1.00	5.13	A
ATOM	1107	CA	ARG	A	152	26.715	28.351	45.099	1.00	9.17	A
ATOM	1108	CB	ARG	A	152	25.914	28.189	43.796	1.00	9.15	A
ATOM	1109	CG	ARG	A	152	24.606	27.376	43.974	1.00	10.79	A
ATOM	1110	CD	ARG	A	152	23.671	27.529	42.755	1.00	17.61	A
ATOM	1111	NE	ARG	A	152	23.071	28.868	42.641	1.00	14.93	A
ATOM	1112	CZ	ARG	A	152	23.188	29.662	41.577	1.00	16.78	A
ATOM	1113	NH1	ARG	A	152	22.605	30.860	41.565	1.00	11.71	A
ATOM	1114	NH2	ARG	A	152	23.885	29.265	40.518	1.00	11.02	A
ATOM	1115	C	ARG	A	152	27.274	27.007	45.557	1.00	7.79	A
ATOM	1116	O	ARG	A	152	26.671	26.313	46.389	1.00	5.08	A
ATOM	1117	N	PHE	A	153	28.436	26.639	45.017	1.00	6.70	A
ATOM	1118	CA	PHE	A	153	29.101	25.395	45.413	1.00	9.70	A
ATOM	1119	CB	PHE	A	153	30.280	25.059	44.478	1.00	7.27	A
ATOM	1120	CG	PHE	A	153	30.974	23.747	44.812	1.00	6.93	A
ATOM	1121	CD1	PHE	A	153	30.451	22.532	44.389	1.00	9.41	A
ATOM	1122	CD2	PHE	A	153	32.134	23.738	45.592	1.00	9.61	A
ATOM	1123	CE1	PHE	A	153	31.069	21.315	44.747	1.00	11.43	A
ATOM	1124	CE2	PHE	A	153	32.764	22.534	45.959	1.00	13.90	A
ATOM	1125	CZ	PHE	A	153	32.229	21.323	45.537	1.00	11.19	A
ATOM	1126	C	PHE	A	153	29.640	25.503	46.842	1.00	8.50	A
ATOM	1127	O	PHE	A	153	29.455	24.586	47.638	1.00	8.41	A
ATOM	1128	N	LEU	A	154	30.320	26.599	47.167	1.00	6.84	A
ATOM	1129	CA	LEU	A	154	30.877	26.752	48.521	1.00	6.20	A
ATOM	1130	CB	LEU	A	154	31.672	28.060	48.657	1.00	6.23	A
ATOM	1131	CG	LEU	A	154	32.876	28.250	47.720	1.00	6.30	A
ATOM	1132	CD1	LEU	A	154	33.543	29.583	48.020	1.00	9.48	A
ATOM	1133	CD2	LEU	A	154	33.893	27.117	47.886	1.00	6.15	A
ATOM	1134	C	LEU	A	154	29.762	26.737	49.564	1.00	6.13	A
ATOM	1135	O	LEU	A	154	29.912	26.170	50.641	1.00	9.16	A

FIGURE 5 (suite)

```
ATOM   1136  N   ASN A 155      28.652  27.376  49.233  1.00  5.19      A
ATOM   1137  CA  ASN A 155      27.493  27.430  50.116  1.00  6.32      A
ATOM   1138  CB  ASN A 155      26.406  28.314  49.486  1.00 11.33      A
ATOM   1139  CG  ASN A 155      25.093  28.294  50.274  1.00 14.59      A
ATOM   1140  OD1 ASN A 155      24.149  27.596  49.906  1.00  9.21      A
ATOM   1141  ND2 ASN A 155      25.034  29.062  51.361  1.00  8.23      A
ATOM   1142  C   ASN A 155      26.929  26.042  50.363  1.00  8.76      A
ATOM   1143  O   ASN A 155      26.465  25.712  51.465  1.00  8.00      A
ATOM   1144  N   ALA A 156      26.965  25.203  49.336  1.00  8.80      A
ATOM   1145  CA  ALA A 156      26.418  23.867  49.493  1.00  7.63      A
ATOM   1146  CB  ALA A 156      26.068  23.300  48.119  1.00  8.06      A
ATOM   1147  C   ALA A 156      27.336  22.882  50.222  1.00 12.23      A
ATOM   1148  O   ALA A 156      26.854  22.037  50.994  1.00  9.62      A
ATOM   1149  N   LYS A 157      28.646  23.029  50.015  1.00  9.93      A
ATOM   1150  CA  LYS A 157      29.623  22.064  50.537  1.00 10.69      A
ATOM   1151  CB  LYS A 157      30.437  21.527  49.352  1.00 14.97      A
ATOM   1152  CG  LYS A 157      29.604  20.877  48.227  1.00 13.56      A
ATOM   1153  CD  LYS A 157      28.855  19.640  48.729  1.00 16.77      A
ATOM   1154  CE  LYS A 157      28.357  18.784  47.575  1.00 22.67      A
ATOM   1155  NZ  LYS A 157      27.652  17.546  48.069  1.00 21.73      A
ATOM   1156  C   LYS A 157      30.611  22.438  51.638  1.00  8.73      A
ATOM   1157  O   LYS A 157      31.215  21.552  52.245  1.00 11.63      A
ATOM   1158  N   CYS A 158      30.821  23.725  51.876  1.00  8.12      A
ATOM   1159  CA  CYS A 158      31.759  24.132  52.916  1.00  8.20      A
ATOM   1160  C   CYS A 158      30.974  24.252  54.207  1.00  9.14      A
ATOM   1161  O   CYS A 158      30.648  25.349  54.661  1.00 10.53      A
ATOM   1162  CB  CYS A 158      32.390  25.464  52.537  1.00 10.13      A
ATOM   1163  SG  CYS A 158      33.331  25.358  50.982  1.00 11.82      A
ATOM   1164  N   THR A 159      30.699  23.108  54.822  1.00  8.92      A
ATOM   1165  CA  THR A 159      29.856  23.091  56.017  1.00  6.75      A
ATOM   1166  CB  THR A 159      28.850  21.933  55.903  1.00 10.13      A
ATOM   1167  OG1 THR A 159      29.551  20.690  55.987  1.00 12.88      A
ATOM   1168  CG2 THR A 159      28.146  21.989  54.527  1.00 14.84      A
ATOM   1169  C   THR A 159      30.545  23.021  57.361  1.00  8.62      A
ATOM   1170  O   THR A 159      29.878  22.956  58.398  1.00  7.39      A
ATOM   1171  N   THR A 160      31.875  23.038  57.358  1.00  8.39      A
ATOM   1172  CA  THR A 160      32.603  22.980  58.612  1.00  9.53      A
ATOM   1173  CB  THR A 160      33.194  21.558  58.889  1.00  8.99      A
ATOM   1174  OG1 THR A 160      34.011  21.140  57.788  1.00 12.55      A
ATOM   1175  CG2 THR A 160      32.083  20.559  59.114  1.00 11.60      A
ATOM   1176  C   THR A 160      33.727  24.010  58.712  1.00 10.20      A
ATOM   1177  O   THR A 160      34.774  23.739  59.314  1.00  8.76      A
ATOM   1178  N   GLN A 161      33.523  25.189  58.121  1.00  8.66      A
ATOM   1179  CA  GLN A 161      34.525  26.260  58.254  1.00  9.46      A
ATOM   1180  CB  GLN A 161      34.564  27.121  56.989  1.00  9.58      A
ATOM   1181  CG  GLN A 161      34.956  26.309  55.742  1.00  7.83      A
ATOM   1182  CD  GLN A 161      36.305  25.608  55.936  1.00 10.81      A
ATOM   1183  OE1 GLN A 161      36.429  24.396  55.758  1.00 12.80      A
ATOM   1184  NE2 GLN A 161      37.306  26.374  56.313  1.00 10.64      A
ATOM   1185  C   GLN A 161      34.058  27.096  59.449  1.00  8.71      A
ATOM   1186  O   GLN A 161      32.979  26.866  59.960  1.00  8.58      A
ATOM   1187  N   PRO A 162      34.870  28.047  59.928  1.00 11.51      A
ATOM   1188  CD  PRO A 162      36.316  28.193  59.693  1.00 10.65      A
ATOM   1189  CA  PRO A 162      34.433  28.869  61.071  1.00  9.23      A
ATOM   1190  CB  PRO A 162      35.631  29.780  61.326  1.00 11.89      A
ATOM   1191  CG  PRO A 162      36.786  28.884  60.979  1.00 14.39      A
ATOM   1192  C   PRO A 162      33.171  29.660  60.727  1.00 10.67      A
ATOM   1193  O   PRO A 162      32.280  29.838  61.567  1.00 12.32      A
ATOM   1194  N   GLY A 163      33.112  30.158  59.492  1.00  8.94      A
ATOM   1195  CA  GLY A 163      31.943  30.903  59.040  1.00 11.83      A
ATOM   1196  C   GLY A 163      31.307  30.149  57.883  1.00 11.53      A
ATOM   1197  O   GLY A 163      31.687  28.989  57.628  1.00  9.27      A
ATOM   1198  N   THR A 164      30.359  30.781  57.178  1.00  7.79      A
ATOM   1199  CA  THR A 164      29.698  30.140  56.039  1.00 10.06      A
ATOM   1200  CB  THR A 164      28.213  29.775  56.347  1.00  9.77      A
ATOM   1201  OG1 THR A 164      27.565  30.914  56.934  1.00 12.97      A
ATOM   1202  CG2 THR A 164      28.119  28.585  57.328  1.00  7.94      A
ATOM   1203  C   THR A 164      29.696  31.081  54.837  1.00 10.41      A
ATOM   1204  O   THR A 164      29.786  32.301  55.001  1.00  7.96      A
ATOM   1205  N   PHE A 165      29.571  30.507  53.637  1.00  7.32      A
ATOM   1206  CA  PHE A 165      29.551  31.275  52.395  1.00  9.34      A
ATOM   1207  CB  PHE A 165      30.321  30.541  51.299  1.00  8.51      A
ATOM   1208  CG  PHE A 165      31.799  30.451  51.539  1.00  7.69      A
ATOM   1209  CD1 PHE A 165      32.659  31.455  51.096  1.00  8.05      A
ATOM   1210  CD2 PHE A 165      32.338  29.338  52.181  1.00 10.52      A
ATOM   1211  CE1 PHE A 165      34.062  31.349  51.288  1.00  6.48      A
```

FIGURE 5 (suite)

ATOM	1212	CE2	PHE	A	165	33.720	29.214	52.385	1.00	6.44	A
ATOM	1213	CZ	PHE	A	165	34.591	30.221	51.935	1.00	7.86	A
ATOM	1214	C	PHE	A	165	28.135	31.467	51.854	1.00	10.39	A
ATOM	1215	O	PHE	A	165	27.428	30.485	51.648	1.00	11.83	A
ATOM	1216	N	ALA	A	166	27.738	32.712	51.601	1.00	8.80	A
ATOM	1217	CA	ALA	A	166	26.424	33.000	51.006	1.00	10.97	A
ATOM	1218	CB	ALA	A	166	25.942	34.397	51.423	1.00	10.57	A
ATOM	1219	C	ALA	A	166	26.593	32.960	49.483	1.00	10.58	A
ATOM	1220	O	ALA	A	166	27.694	33.182	48.968	1.00	7.60	A
ATOM	1221	N	VAL	A	167	25.516	32.668	48.766	1.00	9.26	A
ATOM	1222	CA	VAL	A	167	25.572	32.658	47.303	1.00	7.71	A
ATOM	1223	CB	VAL	A	167	24.384	31.924	46.686	1.00	7.77	A
ATOM	1224	CG1	VAL	A	167	24.546	31.870	45.159	1.00	8.04	A
ATOM	1225	CG2	VAL	A	167	24.283	30.511	47.265	1.00	10.61	A
ATOM	1226	C	VAL	A	167	25.473	34.123	46.875	1.00	8.91	A
ATOM	1227	O	VAL	A	167	24.523	34.816	47.244	1.00	7.79	A
ATOM	1228	N	THR	A	168	26.408	34.580	46.048	1.00	8.13	A
ATOM	1229	CA	THR	A	168	26.411	35.974	45.653	1.00	6.66	A
ATOM	1230	CB	THR	A	168	27.060	36.810	46.769	1.00	13.46	A
ATOM	1231	OG1	THR	A	168	27.129	38.188	46.370	1.00	12.35	A
ATOM	1232	CG2	THR	A	168	28.478	36.311	47.040	1.00	12.28	A
ATOM	1233	C	THR	A	168	27.228	36.178	44.375	1.00	11.69	A
ATOM	1234	O	THR	A	168	27.960	35.282	43.947	1.00	11.22	A
ATOM	1235	N	THR	A	169	27.106	37.352	43.770	1.00	9.36	A
ATOM	1236	CA	THR	A	169	27.888	37.641	42.580	1.00	5.90	A
ATOM	1237	CB	THR	A	169	27.074	38.484	41.565	1.00	11.79	A
ATOM	1238	OG1	THR	A	169	26.724	39.739	42.169	1.00	9.77	A
ATOM	1239	CG2	THR	A	169	25.811	37.747	41.128	1.00	12.13	A
ATOM	1240	C	THR	A	169	29.156	38.450	42.953	1.00	9.03	A
ATOM	1241	O	THR	A	169	30.000	38.712	42.099	1.00	8.64	A
ATOM	1242	N	VAL	A	170	29.279	38.848	44.224	1.00	11.21	A
ATOM	1243	CA	VAL	A	170	30.430	39.641	44.680	1.00	11.07	A
ATOM	1244	CB	VAL	A	170	29.944	41.003	45.248	1.00	8.64	A
ATOM	1245	CG1	VAL	A	170	29.433	41.863	44.106	1.00	8.12	A
ATOM	1246	CG2	VAL	A	170	28.802	40.805	46.208	1.00	14.20	A
ATOM	1247	C	VAL	A	170	31.158	38.830	45.741	1.00	10.94	A
ATOM	1248	O	VAL	A	170	30.694	38.747	46.859	1.00	11.12	A
ATOM	1249	N	PHE	A	171	32.305	38.247	45.386	1.00	11.66	A
ATOM	1250	CA	PHE	A	171	33.003	37.367	46.312	1.00	9.52	A
ATOM	1251	CB	PHE	A	171	34.279	36.775	45.677	1.00	8.67	A
ATOM	1252	CG	PHE	A	171	34.940	35.686	46.519	1.00	10.69	A
ATOM	1253	CD1	PHE	A	171	36.009	35.978	47.358	1.00	9.84	A
ATOM	1254	CD2	PHE	A	171	34.457	34.377	46.502	1.00	14.44	A
ATOM	1255	CE1	PHE	A	171	36.593	34.986	48.184	1.00	8.85	A
ATOM	1256	CE2	PHE	A	171	35.024	33.377	47.311	1.00	12.76	A
ATOM	1257	CZ	PHE	A	171	36.096	33.686	48.158	1.00	12.60	A
ATOM	1258	C	PHE	A	171	33.353	37.977	47.661	1.00	12.55	A
ATOM	1259	O	PHE	A	171	33.292	37.294	48.679	1.00	7.64	A
ATOM	1260	N	ALA	A	172	33.704	39.257	47.677	1.00	6.57	A
ATOM	1261	CA	ALA	A	172	34.088	39.865	48.946	1.00	9.02	A
ATOM	1262	CB	ALA	A	172	34.655	41.279	48.721	1.00	9.26	A
ATOM	1263	C	ALA	A	172	32.948	39.885	49.957	1.00	11.22	A
ATOM	1264	O	ALA	A	172	33.188	40.071	51.155	1.00	10.96	A
ATOM	1265	N	ASN	A	173	31.714	39.677	49.493	1.00	8.23	A
ATOM	1266	CA	ASN	A	173	30.563	39.651	50.409	1.00	10.55	A
ATOM	1267	CB	ASN	A	173	29.361	40.396	49.822	1.00	11.87	A
ATOM	1268	CG	ASN	A	173	29.628	41.862	49.606	1.00	13.88	A
ATOM	1269	OD1	ASN	A	173	30.289	42.512	50.412	1.00	13.36	A
ATOM	1270	ND2	ASN	A	173	29.098	42.398	48.515	1.00	16.29	A
ATOM	1271	C	ASN	A	173	30.062	38.245	50.759	1.00	13.21	A
ATOM	1272	O	ASN	A	173	29.077	38.109	51.498	1.00	10.89	A
ATOM	1273	N	SER	A	174	30.716	37.212	50.238	1.00	7.67	A
ATOM	1274	CA	SER	A	174	30.250	35.859	50.468	1.00	9.24	A
ATOM	1275	CB	SER	A	174	30.869	34.905	49.429	1.00	9.01	A
ATOM	1276	OG	SER	A	174	30.359	33.580	49.598	1.00	8.15	A
ATOM	1277	C	SER	A	174	30.440	35.250	51.863	1.00	7.73	A
ATOM	1278	O	SER	A	174	29.480	34.822	52.506	1.00	8.54	A
ATOM	1279	N	TYR	A	175	31.684	35.160	52.303	1.00	6.67	A
ATOM	1280	CA	TYR	A	175	31.978	34.535	53.599	1.00	6.35	A
ATOM	1281	CB	TYR	A	175	33.493	34.371	53.735	1.00	7.83	A
ATOM	1282	CG	TYR	A	175	33.928	33.429	54.847	1.00	6.19	A
ATOM	1283	CD1	TYR	A	175	34.845	33.842	55.825	1.00	9.13	A
ATOM	1284	CE1	TYR	A	175	35.315	32.938	56.811	1.00	7.78	A
ATOM	1285	CD2	TYR	A	175	33.481	32.102	54.879	1.00	6.63	A
ATOM	1286	CE2	TYR	A	175	33.939	31.206	55.856	1.00	9.07	A
ATOM	1287	CZ	TYR	A	175	34.859	31.633	56.812	1.00	11.83	A

FIGURE 5 (suite)

ATOM	1288	OH	TYR	A	175	35.348	30.731	57.746	1.00	8.85	A
ATOM	1289	C	TYR	A	175	31.424	35.365	54.761	1.00	12.71	A
ATOM	1290	O	TYR	A	175	31.649	36.556	54.806	1.00	7.92	A
ATOM	1291	N	SER	A	176	30.695	34.727	55.683	1.00	9.13	A
ATOM	1292	CA	SER	A	176	30.104	35.431	56.828	1.00	9.94	A
ATOM	1293	CB	SER	A	176	29.372	34.433	57.737	1.00	11.72	A
ATOM	1294	OG	SER	A	176	30.248	33.426	58.245	1.00	9.80	A
ATOM	1295	C	SER	A	176	31.092	36.247	57.659	1.00	11.68	A
ATOM	1296	O	SER	A	176	30.737	37.302	58.184	1.00	12.94	A
ATOM	1297	N	LEU	A	177	32.332	35.787	57.788	1.00	10.90	A
ATOM	1298	CA	LEU	A	177	33.303	36.559	58.561	1.00	12.59	A
ATOM	1299	CB	LEU	A	177	34.231	35.613	59.349	1.00	14.55	A
ATOM	1300	CG	LEU	A	177	33.537	34.649	60.324	1.00	15.21	A
ATOM	1301	CD1	LEU	A	177	34.579	33.649	60.872	1.00	18.41	A
ATOM	1302	CD2	LEU	A	177	32.856	35.452	61.476	1.00	11.73	A
ATOM	1303	C	LEU	A	177	34.139	37.522	57.692	1.00	13.68	A
ATOM	1304	O	LEU	A	177	35.126	38.104	58.163	1.00	12.71	A
ATOM	1305	N	GLY	A	178	33.754	37.680	56.434	1.00	9.18	A
ATOM	1306	CA	GLY	A	178	34.475	38.585	55.541	1.00	12.34	A
ATOM	1307	C	GLY	A	178	35.803	38.098	54.975	1.00	12.74	A
ATOM	1308	O	GLY	A	178	36.205	36.939	55.208	1.00	13.97	A
ATOM	1309	N	LEU	A	179	36.492	38.974	54.224	1.00	9.84	A
ATOM	1310	CA	LEU	A	179	37.787	38.610	53.621	1.00	10.63	A
ATOM	1311	CB	LEU	A	179	38.078	39.437	52.350	1.00	11.33	A
ATOM	1312	CG	LEU	A	179	37.189	39.202	51.120	1.00	10.67	A
ATOM	1313	CD1	LEU	A	179	37.729	40.017	49.934	1.00	12.85	A
ATOM	1314	CD2	LEU	A	179	37.134	37.692	50.787	1.00	15.70	A
ATOM	1315	C	LEU	A	179	38.986	38.779	54.555	1.00	12.52	A
ATOM	1316	O	LEU	A	179	40.096	38.319	54.233	1.00	13.43	A
ATOM	1317	N	SER	A	180	38.788	39.426	55.702	1.00	13.88	A
ATOM	1318	CA	SER	A	180	39.910	39.635	56.612	1.00	17.84	A
ATOM	1319	CB	SER	A	180	39.438	40.187	57.954	1.00	23.37	A
ATOM	1320	OG	SER	A	180	39.006	41.521	57.770	1.00	30.75	A
ATOM	1321	C	SER	A	180	40.776	38.411	56.839	1.00	18.97	A
ATOM	1322	O	SER	A	180	41.990	38.527	56.856	1.00	16.57	A
ATOM	1323	N	PRO	A	181	40.170	37.223	57.010	1.00	17.96	A
ATOM	1324	CD	PRO	A	181	38.739	36.923	57.219	1.00	18.24	A
ATOM	1325	CA	PRO	A	181	40.989	36.023	57.228	1.00	19.35	A
ATOM	1326	CB	PRO	A	181	39.948	34.925	57.436	1.00	20.22	A
ATOM	1327	CG	PRO	A	181	38.804	35.657	58.063	1.00	20.57	A
ATOM	1328	C	PRO	A	181	41.927	35.697	56.063	1.00	24.47	A
ATOM	1329	O	PRO	A	181	42.893	34.943	56.237	1.00	26.18	A
ATOM	1330	N	LEU	A	182	41.646	36.251	54.880	1.00	17.84	A
ATOM	1331	CA	LEU	A	182	42.470	36.002	53.688	1.00	21.43	A
ATOM	1332	CB	LEU	A	182	41.615	36.019	52.410	1.00	20.15	A
ATOM	1333	CG	LEU	A	182	40.748	34.780	52.178	1.00	20.14	A
ATOM	1334	CD1	LEU	A	182	39.849	34.968	50.952	1.00	17.30	A
ATOM	1335	CD2	LEU	A	182	41.679	33.580	52.004	1.00	15.09	A
ATOM	1336	C	LEU	A	182	43.614	36.985	53.490	1.00	27.88	A
ATOM	1337	O	LEU	A	182	43.499	37.909	52.682	1.00	31.51	A
ATOM	1338	N	ALA	A	183	44.726	36.761	54.185	1.00	23.49	A
ATOM	1339	CA	ALA	A	183	45.893	37.639	54.073	1.00	26.24	A
ATOM	1340	CB	ALA	A	183	47.066	37.047	54.860	1.00	22.25	A
ATOM	1341	C	ALA	A	183	46.325	37.920	52.629	1.00	20.58	A
ATOM	1342	O	ALA	A	183	46.623	37.001	51.856	1.00	17.37	A
ATOM	1343	N	GLY	A	184	46.354	39.202	52.278	1.00	17.97	A
ATOM	1344	CA	GLY	A	184	46.762	39.603	50.949	1.00	17.46	A
ATOM	1345	C	GLY	A	184	45.908	39.186	49.755	1.00	12.78	A
ATOM	1346	O	GLY	A	184	46.413	39.159	48.636	1.00	15.39	A
ATOM	1347	N	ALA	A	185	44.634	38.878	49.956	1.00	12.15	A
ATOM	1348	CA	ALA	A	185	43.798	38.500	48.811	1.00	14.55	A
ATOM	1349	CB	ALA	A	185	42.374	38.212	49.271	1.00	14.22	A
ATOM	1350	C	ALA	A	185	43.812	39.649	47.795	1.00	16.74	A
ATOM	1351	O	ALA	A	185	43.780	40.826	48.181	1.00	15.66	A
ATOM	1352	N	VAL	A	186	43.836	39.300	46.507	1.00	9.90	A
ATOM	1353	CA	VAL	A	186	43.880	40.276	45.419	1.00	11.92	A
ATOM	1354	CB	VAL	A	186	45.093	39.969	44.484	1.00	14.98	A
ATOM	1355	CG1	VAL	A	186	45.026	40.816	43.229	1.00	13.29	A
ATOM	1356	CG2	VAL	A	186	46.398	40.226	45.244	1.00	19.64	A
ATOM	1357	C	VAL	A	186	42.608	40.254	44.571	1.00	11.79	A
ATOM	1358	O	VAL	A	186	42.152	39.182	44.149	1.00	11.34	A
ATOM	1359	N	ALA	A	187	42.035	41.430	44.331	1.00	11.06	A
ATOM	1360	CA	ALA	A	187	40.829	41.543	43.508	1.00	10.57	A
ATOM	1361	CB	ALA	A	187	39.897	42.606	44.096	1.00	12.53	A
ATOM	1362	C	ALA	A	187	41.211	41.923	42.079	1.00	13.16	A
ATOM	1363	O	ALA	A	187	42.128	42.736	41.876	1.00	14.58	A

FIGURE 5 (suite)

```
ATOM   1364  N   ALA A 188      40.543  41.328  41.085  1.00  8.38      A
ATOM   1365  CA  ALA A 188      40.832  41.672  39.672  1.00  8.09      A
ATOM   1366  CB  ALA A 188      41.725  40.609  39.018  1.00 10.94      A
ATOM   1367  C   ALA A 188      39.515  41.759  38.913  1.00  9.75      A
ATOM   1368  O   ALA A 188      38.510  41.196  39.349  1.00 10.74      A
ATOM   1369  N   ILE A 189      39.543  42.434  37.766  1.00 10.19      A
ATOM   1370  CA  ILE A 189      38.355  42.646  36.936  1.00  9.71      A
ATOM   1371  CB  ILE A 189      38.300  44.126  36.487  1.00 14.84      A
ATOM   1372  CG2 ILE A 189      37.056  44.394  35.606  1.00 12.56      A
ATOM   1373  CG1 ILE A 189      38.247  45.007  37.720  1.00 13.85      A
ATOM   1374  CD1 ILE A 189      36.964  44.848  38.520  1.00 20.17      A
ATOM   1375  C   ILE A 189      38.307  41.760  35.705  1.00 11.18      A
ATOM   1376  O   ILE A 189      39.260  41.715  34.930  1.00 12.80      A
ATOM   1377  N   GLY A 190      37.185  41.062  35.518  1.00 12.93      A
ATOM   1378  CA  GLY A 190      37.039  40.181  34.368  1.00  9.66      A
ATOM   1379  C   GLY A 190      37.836  38.881  34.432  1.00 11.20      A
ATOM   1380  O   GLY A 190      38.763  38.745  35.238  1.00 12.00      A
ATOM   1381  N   SER A 191      37.494  37.919  33.570  1.00 12.31      A
ATOM   1382  CA  SER A 191      38.216  36.644  33.539  1.00 11.69      A
ATOM   1383  CB  SER A 191      37.530  35.671  32.568  1.00  8.59      A
ATOM   1384  OG  SER A 191      36.224  35.299  33.026  1.00 10.08      A
ATOM   1385  C   SER A 191      39.678  36.896  33.104  1.00 14.30      A
ATOM   1386  O   SER A 191      40.612  36.295  33.638  1.00 11.39      A
ATOM   1387  N   VAL A 192      39.880  37.809  32.156  1.00 11.76      A
ATOM   1388  CA  VAL A 192      41.235  38.101  31.704  1.00 14.84      A
ATOM   1389  CB  VAL A 192      41.273  39.029  30.449  1.00 13.34      A
ATOM   1390  CG1 VAL A 192      40.838  38.252  29.213  1.00 24.13      A
ATOM   1391  CG2 VAL A 192      40.396  40.246  30.678  1.00 29.05      A
ATOM   1392  C   VAL A 192      42.056  38.767  32.804  1.00 11.65      A
ATOM   1393  O   VAL A 192      43.247  38.485  32.940  1.00 14.10      A
ATOM   1394  N   GLY A 193      41.431  39.670  33.559  1.00 12.08      A
ATOM   1395  CA  GLY A 193      42.149  40.344  34.626  1.00 12.16      A
ATOM   1396  C   GLY A 193      42.575  39.354  35.700  1.00 14.30      A
ATOM   1397  O   GLY A 193      43.652  39.486  36.291  1.00  9.20      A
ATOM   1398  N   VAL A 194      41.725  38.369  35.976  1.00  9.32      A
ATOM   1399  CA  VAL A 194      42.069  37.370  36.992  1.00  9.16      A
ATOM   1400  CB  VAL A 194      40.845  36.459  37.341  1.00  7.74      A
ATOM   1401  CG1 VAL A 194      41.309  35.168  38.071  1.00  8.55      A
ATOM   1402  CG2 VAL A 194      39.873  37.247  38.259  1.00 11.33      A
ATOM   1403  C   VAL A 194      43.256  36.524  36.530  1.00 10.65      A
ATOM   1404  O   VAL A 194      44.158  36.255  37.318  1.00 10.00      A
ATOM   1405  N   MET A 195      43.261  36.090  35.265  1.00  9.82      A
ATOM   1406  CA  MET A 195      44.391  35.306  34.775  1.00 11.27      A
ATOM   1407  CB  MET A 195      44.125  34.727  33.381  1.00 13.33      A
ATOM   1408  CG  MET A 195      43.342  33.449  33.381  1.00 16.98      A
ATOM   1409  SD  MET A 195      43.794  32.237  34.698  1.00 19.79      A
ATOM   1410  CE  MET A 195      45.205  31.419  34.043  1.00 16.46      A
ATOM   1411  C   MET A 195      45.672  36.118  34.719  1.00 12.67      A
ATOM   1412  O   MET A 195      46.757  35.579  34.948  1.00 15.56      A
ATOM   1413  N   ALA A 196      45.566  37.401  34.385  1.00 11.82      A
ATOM   1414  CA  ALA A 196      46.750  38.239  34.346  1.00 15.74      A
ATOM   1415  CB  ALA A 196      46.404  39.633  33.833  1.00 14.20      A
ATOM   1416  C   ALA A 196      47.331  38.323  35.768  1.00 16.81      A
ATOM   1417  O   ALA A 196      48.544  38.245  35.945  1.00 15.03      A
ATOM   1418  N   ALA A 197      46.464  38.468  36.778  1.00 13.86      A
ATOM   1419  CA  ALA A 197      46.939  38.538  38.151  1.00 13.25      A
ATOM   1420  CB  ALA A 197      45.790  38.865  39.108  1.00 13.70      A
ATOM   1421  C   ALA A 197      47.547  37.203  38.542  1.00 13.49      A
ATOM   1422  O   ALA A 197      48.618  37.159  39.147  1.00 13.32      A
ATOM   1423  N   ASP A 198      46.853  36.119  38.202  1.00 12.41      A
ATOM   1424  CA  ASP A 198      47.326  34.777  38.547  1.00 16.61      A
ATOM   1425  CB  ASP A 198      46.311  33.719  38.074  1.00 18.96      A
ATOM   1426  CG  ASP A 198      46.605  32.327  38.629  1.00 29.19      A
ATOM   1427  OD1 ASP A 198      46.440  32.107  39.857  1.00 32.24      A
ATOM   1428  OD2 ASP A 198      47.004  31.449  37.834  1.00 34.04      A
ATOM   1429  C   ASP A 198      48.699  34.509  37.928  1.00 17.95      A
ATOM   1430  O   ASP A 198      49.570  33.942  38.585  1.00 18.27      A
ATOM   1431  N   ASN A 199      48.900  34.941  36.684  1.00 16.24      A
ATOM   1432  CA  ASN A 199      50.173  34.733  35.980  1.00 17.75      A
ATOM   1433  CB  ASN A 199      49.941  34.565  34.478  1.00 19.50      A
ATOM   1434  CG  ASN A 199      49.270  33.263  34.122  1.00 21.16      A
ATOM   1435  OD1 ASN A 199      49.454  32.254  34.786  1.00 29.31      A
ATOM   1436  ND2 ASN A 199      48.504  33.275  33.041  1.00 24.39      A
ATOM   1437  C   ASN A 199      51.227  35.832  36.144  1.00 20.64      A
ATOM   1438  O   ASN A 199      52.272  35.762  35.507  1.00 27.47      A
ATOM   1439  N   ASP A 200      50.973  36.838  36.970  1.00 19.22      A
```

FIGURE 5 (suite)

```
ATOM   1440  CA  ASP A 200      51.925  37.937  37.148  1.00 20.54      A
ATOM   1441  CB  ASP A 200      51.350  38.985  38.092  1.00 22.32      A
ATOM   1442  CG  ASP A 200      52.166  40.271  38.105  1.00 23.11      A
ATOM   1443  OD1 ASP A 200      53.356  40.256  37.713  1.00 21.11      A
ATOM   1444  OD2 ASP A 200      51.612  41.296  38.526  1.00 26.57      A
ATOM   1445  C   ASP A 200      53.252  37.431  37.716  1.00 21.98      A
ATOM   1446  O   ASP A 200      53.315  36.967  38.855  1.00 19.25      A
ATOM   1447  N   VAL A 201      54.315  37.511  36.922  1.00 21.71      A
ATOM   1448  CA  VAL A 201      55.611  37.033  37.390  1.00 24.01      A
ATOM   1449  CB  VAL A 201      56.519  36.597  36.216  1.00 23.59      A
ATOM   1450  CG1 VAL A 201      55.910  35.377  35.519  1.00 25.93      A
ATOM   1451  CG2 VAL A 201      56.710  37.754  35.246  1.00 26.53      A
ATOM   1452  C   VAL A 201      56.370  38.046  38.222  1.00 24.27      A
ATOM   1453  O   VAL A 201      57.451  37.744  38.715  1.00 30.90      A
ATOM   1454  N   THR A 202      55.817  39.241  38.402  1.00 23.14      A
ATOM   1455  CA  THR A 202      56.511  40.251  39.190  1.00 23.53      A
ATOM   1456  CB  THR A 202      56.216  41.664  38.696  1.00 22.33      A
ATOM   1457  OG1 THR A 202      54.846  41.999  38.979  1.00 24.30      A
ATOM   1458  CG2 THR A 202      56.489  41.759  37.210  1.00 25.94      A
ATOM   1459  C   THR A 202      56.171  40.184  40.677  1.00 24.49      A
ATOM   1460  O   THR A 202      56.543  41.073  41.444  1.00 25.68      A
ATOM   1461  N   THR A 203      55.440  39.147  41.076  1.00 19.97      A
ATOM   1462  CA  THR A 203      55.116  38.957  42.484  1.00 20.69      A
ATOM   1463  CB  THR A 203      53.608  39.167  42.768  1.00 26.13      A
ATOM   1464  OG1 THR A 203      52.825  38.196  42.047  1.00 25.13      A
ATOM   1465  CG2 THR A 203      53.202  40.581  42.363  1.00 26.59      A
ATOM   1466  C   THR A 203      55.523  37.521  42.834  1.00 17.47      A
ATOM   1467  O   THR A 203      55.771  36.703  41.947  1.00 18.21      A
ATOM   1468  N   ALA A 204      55.624  37.217  44.116  1.00 16.96      A
ATOM   1469  CA  ALA A 204      56.011  35.867  44.528  1.00 16.26      A
ATOM   1470  CB  ALA A 204      56.175  35.825  46.065  1.00 18.50      A
ATOM   1471  C   ALA A 204      54.978  34.832  44.092  1.00 14.92      A
ATOM   1472  O   ALA A 204      53.806  35.157  43.906  1.00 16.09      A
ATOM   1473  N   GLN A 205      55.409  33.582  43.921  1.00 16.21      A
ATOM   1474  CA  GLN A 205      54.483  32.501  43.560  1.00 16.27      A
ATOM   1475  CB  GLN A 205      55.232  31.191  43.316  1.00 15.65      A
ATOM   1476  CG  GLN A 205      56.103  31.148  42.097  1.00 22.41      A
ATOM   1477  CD  GLN A 205      56.469  29.716  41.717  1.00 29.28      A
ATOM   1478  OE1 GLN A 205      56.446  28.801  42.565  1.00 20.67      A
ATOM   1479  NE2 GLN A 205      56.813  29.510  40.442  1.00 25.77      A
ATOM   1480  C   GLN A 205      53.529  32.262  44.728  1.00 14.53      A
ATOM   1481  O   GLN A 205      53.783  32.717  45.846  1.00 14.81      A
ATOM   1482  N   GLY A 206      52.438  31.540  44.478  1.00 11.64      A
ATOM   1483  CA  GLY A 206      51.509  31.236  45.554  1.00 11.46      A
ATOM   1484  C   GLY A 206      50.042  31.518  45.284  1.00 11.44      A
ATOM   1485  O   GLY A 206      49.162  31.067  46.046  1.00  9.87      A
ATOM   1486  N   ARG A 207      49.764  32.236  44.199  1.00  7.71      A
ATOM   1487  CA  ARG A 207      48.383  32.606  43.878  1.00  7.50      A
ATOM   1488  CB  ARG A 207      48.364  33.763  42.863  1.00  9.66      A
ATOM   1489  CG  ARG A 207      48.719  35.114  43.493  1.00  7.35      A
ATOM   1490  CD  ARG A 207      48.774  36.286  42.497  1.00  6.76      A
ATOM   1491  NE  ARG A 207      49.079  37.532  43.221  1.00 10.86      A
ATOM   1492  CZ  ARG A 207      49.156  38.738  42.654  1.00 13.78      A
ATOM   1493  NH1 ARG A 207      48.957  38.881  41.350  1.00  9.77      A
ATOM   1494  NH2 ARG A 207      49.415  39.811  43.398  1.00 15.04      A
ATOM   1495  C   ARG A 207      47.500  31.475  43.389  1.00 11.20      A
ATOM   1496  O   ARG A 207      47.959  30.549  42.713  1.00 12.10      A
ATOM   1497  N   ILE A 208      46.214  31.572  43.721  1.00  8.65      A
ATOM   1498  CA  ILE A 208      45.245  30.557  43.331  1.00  8.62      A
ATOM   1499  CB  ILE A 208      45.073  29.491  44.476  1.00 11.42      A
ATOM   1500  CG2 ILE A 208      44.533  30.157  45.766  1.00  8.84      A
ATOM   1501  CG1 ILE A 208      44.158  28.359  43.984  1.00 12.09      A
ATOM   1502  CD1 ILE A 208      44.207  27.094  44.823  1.00 11.77      A
ATOM   1503  C   ILE A 208      43.924  31.286  43.056  1.00 10.31      A
ATOM   1504  O   ILE A 208      43.664  32.335  43.649  1.00 12.81      A
ATOM   1505  N   THR A 209      43.098  30.776  42.145  1.00  7.78      A
ATOM   1506  CA  THR A 209      41.825  31.470  41.864  1.00  9.01      A
ATOM   1507  CB  THR A 209      42.055  32.610  40.849  1.00 11.48      A
ATOM   1508  OG1 THR A 209      40.906  33.455  40.789  1.00 11.18      A
ATOM   1509  CG2 THR A 209      42.310  32.030  39.460  1.00 12.27      A
ATOM   1510  C   THR A 209      40.751  30.534  41.319  1.00 10.48      A
ATOM   1511  O   THR A 209      40.978  29.326  41.215  1.00 10.85      A
ATOM   1512  N   TYR A 210      39.577  31.087  40.997  1.00  8.58      A
ATOM   1513  CA  TYR A 210      38.476  30.303  40.422  1.00  8.34      A
ATOM   1514  CB  TYR A 210      37.244  30.304  41.350  1.00  4.35      A
ATOM   1515  CG  TYR A 210      36.685  31.664  41.695  1.00  7.98      A
```

FIGURE 5 (suite)

```
ATOM   1516  CD1 TYR A 210      35.656  32.240  40.927  1.00  6.11      A
ATOM   1517  CE1 TYR A 210      35.153  33.509  41.235  1.00  7.73      A
ATOM   1518  CD2 TYR A 210      37.188  32.386  42.778  1.00  6.57      A
ATOM   1519  CE2 TYR A 210      36.699  33.643  43.086  1.00  5.93      A
ATOM   1520  CZ  TYR A 210      35.687  34.203  42.313  1.00  8.47      A
ATOM   1521  OH  TYR A 210      35.242  35.475  42.598  1.00  8.24      A
ATOM   1522  C   TYR A 210      38.169  30.983  39.087  1.00  5.52      A
ATOM   1523  O   TYR A 210      38.184  32.222  39.010  1.00  9.37      A
ATOM   1524  N   ILE A 211      37.934  30.201  38.032  1.00  6.28      A
ATOM   1525  CA  ILE A 211      37.720  30.832  36.735  1.00  7.52      A
ATOM   1526  CB  ILE A 211      39.085  31.384  36.235  1.00 11.97      A
ATOM   1527  CG2 ILE A 211      39.990  30.231  35.830  1.00 10.21      A
ATOM   1528  CG1 ILE A 211      38.902  32.361  35.075  1.00 14.62      A
ATOM   1529  CD1 ILE A 211      40.159  33.203  34.806  1.00 15.71      A
ATOM   1530  C   ILE A 211      37.132  29.936  35.648  1.00  8.22      A
ATOM   1531  O   ILE A 211      37.080  28.703  35.778  1.00  8.13      A
ATOM   1532  N   SER A 212      36.634  30.590  34.602  1.00  9.06      A
ATOM   1533  CA  SER A 212      36.140  29.913  33.394  1.00  9.98      A
ATOM   1534  CB  SER A 212      35.984  30.934  32.256  1.00  8.45      A
ATOM   1535  OG  SER A 212      35.637  30.283  31.037  1.00  9.53      A
ATOM   1536  C   SER A 212      37.181  28.904  32.914  1.00 10.00      A
ATOM   1537  O   SER A 212      38.361  29.234  32.812  1.00  7.50      A
ATOM   1538  N   PRO A 213      36.761  27.668  32.585  1.00  8.50      A
ATOM   1539  CD  PRO A 213      35.436  27.030  32.686  1.00  4.78      A
ATOM   1540  CA  PRO A 213      37.781  26.728  32.117  1.00  8.39      A
ATOM   1541  CB  PRO A 213      37.035  25.392  32.059  1.00 10.29      A
ATOM   1542  CG  PRO A 213      35.578  25.849  31.743  1.00  9.33      A
ATOM   1543  C   PRO A 213      38.360  27.149  30.777  1.00 10.79      A
ATOM   1544  O   PRO A 213      39.433  26.698  30.390  1.00 10.83      A
ATOM   1545  N   ASP A 214      37.668  28.038  30.074  1.00  5.80      A
ATOM   1546  CA  ASP A 214      38.164  28.514  28.775  1.00  8.50      A
ATOM   1547  CB  ASP A 214      37.033  29.175  27.997  1.00  7.35      A
ATOM   1548  CG  ASP A 214      37.248  29.146  26.497  1.00 11.12      A
ATOM   1549  OD1 ASP A 214      36.479  29.849  25.801  1.00 11.42      A
ATOM   1550  OD2 ASP A 214      38.159  28.428  26.007  1.00 10.72      A
ATOM   1551  C   ASP A 214      39.314  29.526  28.935  1.00 12.08      A
ATOM   1552  O   ASP A 214      39.933  29.931  27.943  1.00 13.08      A
ATOM   1553  N   PHE A 215      39.572  29.958  30.170  1.00  9.47      A
ATOM   1554  CA  PHE A 215      40.662  30.901  30.459  1.00  9.63      A
ATOM   1555  CB  PHE A 215      40.121  32.106  31.233  1.00 12.63      A
ATOM   1556  CG  PHE A 215      39.375  33.081  30.402  1.00  9.86      A
ATOM   1557  CD1 PHE A 215      39.957  34.301  30.067  1.00 11.72      A
ATOM   1558  CD2 PHE A 215      38.074  32.812  29.986  1.00 11.34      A
ATOM   1559  CE1 PHE A 215      39.250  35.250  29.332  1.00 11.89      A
ATOM   1560  CE2 PHE A 215      37.357  33.759  29.245  1.00  6.37      A
ATOM   1561  CZ  PHE A 215      37.949  34.976  28.921  1.00 13.90      A
ATOM   1562  C   PHE A 215      41.748  30.286  31.356  1.00 13.88      A
ATOM   1563  O   PHE A 215      42.837  30.865  31.480  1.00 12.28      A
ATOM   1564  N   ALA A 216      41.463  29.131  31.976  1.00  9.02      A
ATOM   1565  CA  ALA A 216      42.404  28.535  32.936  1.00  9.41      A
ATOM   1566  CB  ALA A 216      41.705  27.432  33.753  1.00  9.18      A
ATOM   1567  C   ALA A 216      43.727  28.007  32.406  1.00 13.18      A
ATOM   1568  O   ALA A 216      44.679  27.844  33.178  1.00 16.82      A
ATOM   1569  N   ALA A 217      43.790  27.719  31.106  1.00 12.39      A
ATOM   1570  CA  ALA A 217      45.031  27.224  30.522  1.00 14.59      A
ATOM   1571  CB  ALA A 217      45.094  25.693  30.625  1.00 15.34      A
ATOM   1572  C   ALA A 217      45.136  27.660  29.063  1.00 16.52      A
ATOM   1573  O   ALA A 217      44.128  27.958  28.418  1.00 14.71      A
ATOM   1574  N   PRO A 218      46.358  27.690  28.517  1.00 18.85      A
ATOM   1575  CD  PRO A 218      47.657  27.532  29.194  1.00 19.53      A
ATOM   1576  CA  PRO A 218      46.533  28.101  27.111  1.00 17.17      A
ATOM   1577  CB  PRO A 218      48.053  28.171  26.952  1.00 22.03      A
ATOM   1578  CG  PRO A 218      48.553  28.433  28.357  1.00 24.10      A
ATOM   1579  C   PRO A 218      45.889  27.162  26.076  1.00 17.95      A
ATOM   1580  O   PRO A 218      45.490  27.606  24.986  1.00 20.60      A
ATOM   1581  N   SER A 219      45.804  25.872  26.395  1.00 12.39      A
ATOM   1582  CA  SER A 219      45.212  24.883  25.490  1.00 11.61      A
ATOM   1583  CB  SER A 219      46.308  24.053  24.816  1.00 17.69      A
ATOM   1584  OG  SER A 219      46.870  23.140  25.749  1.00 17.25      A
ATOM   1585  C   SER A 219      44.341  23.942  26.324  1.00 14.52      A
ATOM   1586  O   SER A 219      44.454  23.896  27.559  1.00 15.86      A
ATOM   1587  N   LEU A 220      43.479  23.180  25.664  1.00 13.85      A
ATOM   1588  CA  LEU A 220      42.614  22.250  26.389  1.00 13.63      A
ATOM   1589  CB  LEU A 220      41.705  21.491  25.401  1.00 15.59      A
ATOM   1590  CG  LEU A 220      40.632  22.337  24.707  1.00 16.07      A
ATOM   1591  CD1 LEU A 220      39.908  21.517  23.646  1.00 15.58      A
```

FIGURE 5 (suite)

ATOM	1592	CD2	LEU	A	220	39.635	22.855	25.752	1.00	16.33	A
ATOM	1593	C	LEU	A	220	43.401	21.251	27.245	1.00	15.71	A
ATOM	1594	O	LEU	A	220	43.034	20.986	28.395	1.00	15.65	A
ATOM	1595	N	ALA	A	221	44.481	20.693	26.698	1.00	15.60	A
ATOM	1596	CA	ALA	A	221	45.283	19.714	27.452	1.00	18.03	A
ATOM	1597	CB	ALA	A	221	46.452	19.175	26.604	1.00	17.58	A
ATOM	1598	C	ALA	A	221	45.834	20.298	28.738	1.00	11.01	A
ATOM	1599	O	ALA	A	221	46.085	19.573	29.687	1.00	15.45	A
ATOM	1600	N	GLY	A	222	46.038	21.612	28.754	1.00	15.25	A
ATOM	1601	CA	GLY	A	222	46.561	22.267	29.947	1.00	11.71	A
ATOM	1602	C	GLY	A	222	45.641	22.101	31.144	1.00	10.72	A
ATOM	1603	O	GLY	A	222	46.105	22.139	32.280	1.00	14.13	A
ATOM	1604	N	LEU	A	223	44.340	21.938	30.914	1.00	11.19	A
ATOM	1605	CA	LEU	A	223	43.406	21.751	32.033	1.00	8.14	A
ATOM	1606	CB	LEU	A	223	41.946	21.728	31.525	1.00	9.90	A
ATOM	1607	CG	LEU	A	223	41.481	23.046	30.874	1.00	9.91	A
ATOM	1608	CD1	LEU	A	223	40.035	22.918	30.331	1.00	9.85	A
ATOM	1609	CD2	LEU	A	223	41.570	24.153	31.926	1.00	9.05	A
ATOM	1610	C	LEU	A	223	43.720	20.444	32.773	1.00	11.22	A
ATOM	1611	O	LEU	A	223	43.369	20.297	33.939	1.00	7.21	A
ATOM	1612	N	ASN	A	224	44.389	19.505	32.100	1.00	9.60	A
ATOM	1613	CA	ASN	A	224	44.742	18.231	32.727	1.00	10.35	A
ATOM	1614	CB	ASN	A	224	44.651	17.078	31.706	1.00	13.70	A
ATOM	1615	CG	ASN	A	224	43.214	16.768	31.301	1.00	15.75	A
ATOM	1616	OD1	ASN	A	224	42.347	16.610	32.146	1.00	21.72	A
ATOM	1617	ND2	ASN	A	224	42.968	16.666	30.012	1.00	14.86	A
ATOM	1618	C	ASN	A	224	46.138	18.239	33.359	1.00	12.93	A
ATOM	1619	O	ASN	A	224	46.580	17.226	33.898	1.00	14.86	A
ATOM	1620	N	ASP	A	225	46.833	19.370	33.308	1.00	8.74	A
ATOM	1621	CA	ASP	A	225	48.163	19.437	33.932	1.00	12.69	A
ATOM	1622	CB	ASP	A	225	49.031	20.467	33.199	1.00	11.40	A
ATOM	1623	CG	ASP	A	225	50.402	20.654	33.843	1.00	15.89	A
ATOM	1624	OD1	ASP	A	225	50.673	20.076	34.922	1.00	14.10	A
ATOM	1625	OD2	ASP	A	225	51.211	21.401	33.261	1.00	16.19	A
ATOM	1626	C	ASP	A	225	47.960	19.844	35.398	1.00	13.53	A
ATOM	1627	O	ASP	A	225	47.776	21.016	35.691	1.00	10.79	A
ATOM	1628	N	ALA	A	226	48.035	18.882	36.317	1.00	10.49	A
ATOM	1629	CA	ALA	A	226	47.792	19.178	37.720	1.00	9.18	A
ATOM	1630	CB	ALA	A	226	47.424	17.889	38.478	1.00	13.20	A
ATOM	1631	C	ALA	A	226	48.881	19.939	38.461	1.00	12.23	A
ATOM	1632	O	ALA	A	226	48.773	20.144	39.678	1.00	13.15	A
ATOM	1633	N	THR	A	227	49.935	20.347	37.762	1.00	10.64	A
ATOM	1634	CA	THR	A	227	50.955	21.148	38.426	1.00	10.50	A
ATOM	1635	CB	THR	A	227	52.405	20.854	37.917	1.00	15.63	A
ATOM	1636	OG1	THR	A	227	52.541	21.287	36.561	1.00	13.88	A
ATOM	1637	CG2	THR	A	227	52.718	19.374	38.009	1.00	16.59	A
ATOM	1638	C	THR	A	227	50.620	22.628	38.154	1.00	9.17	A
ATOM	1639	O	THR	A	227	51.320	23.509	38.626	1.00	10.52	A
ATOM	1640	N	LYS	A	228	49.530	22.876	37.414	1.00	9.27	A
ATOM	1641	CA	LYS	A	228	49.079	24.226	37.069	1.00	12.05	A
ATOM	1642	CB	LYS	A	228	49.378	24.511	35.594	1.00	15.38	A
ATOM	1643	CG	LYS	A	228	50.877	24.607	35.272	1.00	22.71	A
ATOM	1644	CD	LYS	A	228	51.125	24.652	33.758	1.00	20.66	A
ATOM	1645	CE	LYS	A	228	52.613	24.720	33.447	1.00	26.84	A
ATOM	1646	NZ	LYS	A	228	53.205	25.974	33.986	1.00	37.16	A
ATOM	1647	C	LYS	A	228	47.576	24.453	37.313	1.00	8.78	A
ATOM	1648	O	LYS	A	228	47.153	25.574	37.634	1.00	9.99	A
ATOM	1649	N	VAL	A	229	46.777	23.407	37.100	1.00	9.98	A
ATOM	1650	CA	VAL	A	229	45.327	23.465	37.282	1.00	6.71	A
ATOM	1651	CB	VAL	A	229	44.611	23.300	35.939	1.00	8.87	A
ATOM	1652	CG1	VAL	A	229	43.082	23.303	36.150	1.00	10.77	A
ATOM	1653	CG2	VAL	A	229	45.019	24.468	34.988	1.00	10.90	A
ATOM	1654	C	VAL	A	229	44.913	22.339	38.245	1.00	10.51	A
ATOM	1655	O	VAL	A	229	45.107	21.154	37.967	1.00	8.04	A
ATOM	1656	N	ALA	A	230	44.343	22.706	39.383	1.00	10.29	A
ATOM	1657	CA	ALA	A	230	43.985	21.696	40.387	1.00	8.30	A
ATOM	1658	CB	ALA	A	230	43.612	22.380	41.677	1.00	10.71	A
ATOM	1659	C	ALA	A	230	42.900	20.691	40.064	1.00	12.18	A
ATOM	1660	O	ALA	A	230	41.884	21.020	39.435	1.00	12.58	A
ATOM	1661	N	ARG	A	231	43.120	19.452	40.501	1.00	8.23	A
ATOM	1662	CA	ARG	A	231	42.080	18.436	40.382	1.00	8.98	A
ATOM	1663	CB	ARG	A	231	42.656	17.021	40.495	1.00	11.67	A
ATOM	1664	CG	ARG	A	231	43.433	16.581	39.265	1.00	14.58	A
ATOM	1665	CD	ARG	A	231	44.130	15.244	39.487	1.00	18.76	A
ATOM	1666	NE	ARG	A	231	44.972	14.941	38.336	1.00	19.63	A
ATOM	1667	CZ	ARG	A	231	45.931	14.029	38.331	1.00	26.24	A

FIGURE 5 (suite)

```
ATOM   1668  NH1 ARG A 231      46.184  13.312  39.426  1.00 22.17      A
ATOM   1669  NH2 ARG A 231      46.649  13.848  37.228  1.00 31.31      A
ATOM   1670  C   ARG A 231      41.271  18.738  41.632  1.00  8.66      A
ATOM   1671  O   ARG A 231      41.801  19.332  42.582  1.00 13.24      A
ATOM   1672  N   THR A 232      39.997  18.371  41.640  1.00  9.11      A
ATOM   1673  CA  THR A 232      39.180  18.607  42.822  1.00 11.84      A
ATOM   1674  CB  THR A 232      38.236  19.820  42.623  1.00 13.64      A
ATOM   1675  OG1 THR A 232      39.017  21.004  42.384  1.00 17.60      A
ATOM   1676  CG2 THR A 232      37.382  20.025  43.883  1.00 14.43      A
ATOM   1677  C   THR A 232      38.357  17.351  43.071  1.00  9.12      A
ATOM   1678  O   THR A 232      37.869  16.747  42.118  1.00 13.13      A
ATOM   1679  N   GLY A 233      38.240  16.934  44.332  1.00  9.55      A
ATOM   1680  CA  GLY A 233      37.466  15.739  44.636  1.00 13.57      A
ATOM   1681  C   GLY A 233      38.197  14.616  45.364  1.00 14.09      A
ATOM   1682  O   GLY A 233      37.634  13.556  45.591  1.00 16.30      A
ATOM   1683  N   LYS A 234      39.460  14.831  45.706  1.00 14.67      A
ATOM   1684  CA  LYS A 234      40.226  13.834  46.438  1.00 15.04      A
ATOM   1685  CB  LYS A 234      41.577  14.442  46.830  1.00 13.37      A
ATOM   1686  CG  LYS A 234      42.483  13.576  47.688  1.00 14.40      A
ATOM   1687  CD  LYS A 234      43.807  14.314  47.968  1.00 17.84      A
ATOM   1688  CE  LYS A 234      43.594  15.567  48.839  1.00 15.78      A
ATOM   1689  NZ  LYS A 234      44.766  16.501  48.832  1.00 12.74      A
ATOM   1690  C   LYS A 234      39.450  13.411  47.697  1.00 17.96      A
ATOM   1691  O   LYS A 234      38.826  14.240  48.369  1.00 13.45      A
ATOM   1692  N   GLY A 235      39.489  12.124  48.031  1.00 15.80      A
ATOM   1693  CA  GLY A 235      38.785  11.694  49.223  1.00 15.51      A
ATOM   1694  C   GLY A 235      38.764  10.191  49.402  1.00 19.91      A
ATOM   1695  O   GLY A 235      39.586   9.472  48.825  1.00 21.77      A
ATOM   1696  N   SER A 236      37.811   9.731  50.204  1.00 21.18      A
ATOM   1697  CA  SER A 236      37.624   8.311  50.489  1.00 24.63      A
ATOM   1698  CB  SER A 236      38.018   8.004  51.929  1.00 25.33      A
ATOM   1699  OG  SER A 236      39.359   8.397  52.161  1.00 33.33      A
ATOM   1700  C   SER A 236      36.159   7.969  50.291  1.00 26.45      A
ATOM   1701  O   SER A 236      35.282   8.624  50.855  1.00 27.89      A
ATOM   1702  N   SER A 237      35.891   6.947  49.488  1.00 22.58      A
ATOM   1703  CA  SER A 237      34.522   6.520  49.238  1.00 23.79      A
ATOM   1704  CB  SER A 237      34.123   6.799  47.786  1.00 25.37      A
ATOM   1705  OG  SER A 237      34.019   8.197  47.578  1.00 38.24      A
ATOM   1706  C   SER A 237      34.429   5.036  49.514  1.00 21.92      A
ATOM   1707  O   SER A 237      35.244   4.267  49.009  1.00 20.25      A
ATOM   1708  N   SER A 238      33.423   4.640  50.295  1.00 25.14      A
ATOM   1709  CA  SER A 238      33.233   3.236  50.662  1.00 24.45      A
ATOM   1710  CB  SER A 238      32.716   2.427  49.471  1.00 27.22      A
ATOM   1711  OG  SER A 238      31.371   2.785  49.163  1.00 39.35      A
ATOM   1712  C   SER A 238      34.559   2.670  51.159  1.00 23.39      A
ATOM   1713  O   SER A 238      34.961   1.557  50.809  1.00 24.29      A
ATOM   1714  N   GLY A 239      35.249   3.468  51.966  1.00 24.50      A
ATOM   1715  CA  GLY A 239      36.519   3.040  52.524  1.00 25.11      A
ATOM   1716  C   GLY A 239      37.705   2.973  51.584  1.00 28.40      A
ATOM   1717  O   GLY A 239      38.755   2.452  51.969  1.00 28.03      A
ATOM   1718  N   GLY A 240      37.563   3.495  50.365  1.00 21.59      A
ATOM   1719  CA  GLY A 240      38.677   3.459  49.431  1.00 26.05      A
ATOM   1720  C   GLY A 240      39.082   4.858  48.984  1.00 24.32      A
ATOM   1721  O   GLY A 240      38.218   5.685  48.714  1.00 23.70      A
ATOM   1722  N   GLY A 241      40.386   5.121  48.920  1.00 21.49      A
ATOM   1723  CA  GLY A 241      40.873   6.422  48.500  1.00 27.38      A
ATOM   1724  C   GLY A 241      40.495   6.715  47.058  1.00 28.81      A
ATOM   1725  O   GLY A 241      40.585   5.840  46.200  1.00 28.58      A
ATOM   1726  N   ALA A 242      40.057   7.939  46.784  1.00 24.66      A
ATOM   1727  CA  ALA A 242      39.663   8.303  45.434  1.00 22.08      A
ATOM   1728  CB  ALA A 242      38.159   8.527  45.367  1.00 25.95      A
ATOM   1729  C   ALA A 242      40.385   9.573  45.043  1.00 22.46      A
ATOM   1730  O   ALA A 242      40.541  10.472  45.869  1.00 16.67      A
ATOM   1731  N   GLU A 243      40.813   9.647  43.785  1.00 16.24      A
ATOM   1732  CA  GLU A 243      41.502  10.830  43.289  1.00 18.78      A
ATOM   1733  CB  GLU A 243      42.444  10.473  42.132  1.00 23.30      A
ATOM   1734  CG  GLU A 243      43.643   9.624  42.499  1.00 31.37      A
ATOM   1735  CD  GLU A 243      44.658   9.584  41.368  1.00 37.64      A
ATOM   1736  OE1 GLU A 243      44.234   9.507  40.195  1.00 38.59      A
ATOM   1737  OE2 GLU A 243      45.876   9.628  41.644  1.00 41.94      A
ATOM   1738  C   GLU A 243      40.469  11.817  42.757  1.00 15.80      A
ATOM   1739  O   GLU A 243      39.417  11.406  42.285  1.00 17.65      A
ATOM   1740  N   GLY A 244      40.765  13.111  42.827  1.00 15.34      A
ATOM   1741  CA  GLY A 244      39.832  14.101  42.286  1.00 16.23      A
ATOM   1742  C   GLY A 244      39.994  14.161  40.770  1.00 16.48      A
ATOM   1743  O   GLY A 244      40.894  13.528  40.228  1.00 14.37      A
```

FIGURE 5 (suite)

```
ATOM   1744  N   LYS A 245      39.148  14.939  40.096  1.00 14.99      A
ATOM   1745  CA  LYS A 245      39.186  15.079  38.632  1.00 14.88      A
ATOM   1746  CB  LYS A 245      37.792  14.795  38.060  1.00 13.06      A
ATOM   1747  CG  LYS A 245      37.294  13.363  38.289  1.00 22.95      A
ATOM   1748  CD  LYS A 245      38.174  12.353  37.540  1.00 27.44      A
ATOM   1749  CE  LYS A 245      37.596  10.939  37.643  1.00 27.64      A
ATOM   1750  NZ  LYS A 245      37.298  10.599  39.063  1.00 36.34      A
ATOM   1751  C   LYS A 245      39.617  16.471  38.165  1.00 13.81      A
ATOM   1752  O   LYS A 245      39.580  17.431  38.932  1.00 10.66      A
ATOM   1753  N   SER A 246      40.022  16.572  36.902  1.00 14.72      A
ATOM   1754  CA  SER A 246      40.405  17.856  36.344  1.00 11.87      A
ATOM   1755  CB  SER A 246      41.299  17.687  35.104  1.00 12.31      A
ATOM   1756  OG  SER A 246      40.515  17.215  34.011  1.00  9.67      A
ATOM   1757  C   SER A 246      39.095  18.500  35.913  1.00 10.79      A
ATOM   1758  O   SER A 246      38.076  17.815  35.735  1.00 10.08      A
ATOM   1759  N   PRO A 247      39.114  19.825  35.698  1.00 10.98      A
ATOM   1760  CD  PRO A 247      40.243  20.747  35.947  1.00  7.03      A
ATOM   1761  CA  PRO A 247      37.909  20.545  35.275  1.00  9.29      A
ATOM   1762  CB  PRO A 247      38.210  21.988  35.692  1.00  7.19      A
ATOM   1763  CG  PRO A 247      39.737  22.094  35.385  1.00  9.12      A
ATOM   1764  C   PRO A 247      37.632  20.416  33.765  1.00  9.99      A
ATOM   1765  O   PRO A 247      36.865  21.197  33.222  1.00 11.54      A
ATOM   1766  N   ALA A 248      38.253  19.449  33.083  1.00  9.23      A
ATOM   1767  CA  ALA A 248      37.992  19.278  31.638  1.00 12.63      A
ATOM   1768  CB  ALA A 248      38.832  18.097  31.069  1.00 10.35      A
ATOM   1769  C   ALA A 248      36.487  19.021  31.431  1.00 15.07      A
ATOM   1770  O   ALA A 248      35.838  18.390  32.278  1.00 11.60      A
ATOM   1771  N   ALA A 249      35.935  19.497  30.311  1.00 12.95      A
ATOM   1772  CA  ALA A 249      34.498  19.332  30.037  1.00 11.90      A
ATOM   1773  CB  ALA A 249      34.141  19.886  28.633  1.00 12.61      A
ATOM   1774  C   ALA A 249      34.037  17.890  30.149  1.00 15.30      A
ATOM   1775  O   ALA A 249      32.953  17.617  30.666  1.00 14.63      A
ATOM   1776  N   ALA A 250      34.845  16.949  29.672  1.00 14.76      A
ATOM   1777  CA  ALA A 250      34.426  15.542  29.769  1.00 18.41      A
ATOM   1778  CB  ALA A 250      35.486  14.623  29.168  1.00 15.53      A
ATOM   1779  C   ALA A 250      34.118  15.102  31.200  1.00 15.76      A
ATOM   1780  O   ALA A 250      33.366  14.154  31.410  1.00 14.59      A
ATOM   1781  N   ASN A 251      34.677  15.785  32.190  1.00 14.82      A
ATOM   1782  CA  ASN A 251      34.433  15.380  33.575  1.00 13.85      A
ATOM   1783  CB  ASN A 251      35.665  15.696  34.441  1.00 12.26      A
ATOM   1784  CG  ASN A 251      36.880  14.885  34.022  1.00 14.85      A
ATOM   1785  OD1 ASN A 251      36.755  13.712  33.653  1.00 14.23      A
ATOM   1786  ND2 ASN A 251      38.056  15.487  34.091  1.00 13.09      A
ATOM   1787  C   ASN A 251      33.168  15.968  34.210  1.00 16.10      A
ATOM   1788  O   ASN A 251      32.877  15.686  35.357  1.00 14.41      A
ATOM   1789  N   SER A 252      32.431  16.806  33.482  1.00 13.25      A
ATOM   1790  CA  SER A 252      31.191  17.346  34.039  1.00 10.81      A
ATOM   1791  CB  SER A 252      31.262  18.868  34.209  1.00 22.32      A
ATOM   1792  OG  SER A 252      31.266  19.536  32.953  1.00 23.58      A
ATOM   1793  C   SER A 252      30.027  16.982  33.101  1.00 11.68      A
ATOM   1794  O   SER A 252      28.862  17.077  33.479  1.00 12.18      A
ATOM   1795  N   SER A 253      30.365  16.501  31.904  1.00 11.74      A
ATOM   1796  CA  SER A 253      29.367  16.138  30.918  1.00 10.64      A
ATOM   1797  CB  SER A 253      30.048  15.572  29.665  1.00 18.81      A
ATOM   1798  OG  SER A 253      29.052  15.263  28.704  1.00 27.87      A
ATOM   1799  C   SER A 253      28.294  15.139  31.382  1.00 15.51      A
ATOM   1800  O   SER A 253      27.112  15.319  31.102  1.00 11.29      A
ATOM   1801  N   ALA A 254      28.692  14.080  32.081  1.00 12.85      A
ATOM   1802  CA  ALA A 254      27.700  13.084  32.525  1.00 14.75      A
ATOM   1803  CB  ALA A 254      28.423  11.868  33.216  1.00 13.94      A
ATOM   1804  C   ALA A 254      26.656  13.667  33.472  1.00 14.13      A
ATOM   1805  O   ALA A 254      25.457  13.394  33.342  1.00 14.40      A
ATOM   1806  N   ALA A 255      27.111  14.457  34.441  1.00 11.77      A
ATOM   1807  CA  ALA A 255      26.205  15.070  35.401  1.00 13.30      A
ATOM   1808  CB  ALA A 255      27.009  15.838  36.460  1.00 12.60      A
ATOM   1809  C   ALA A 255      25.223  16.017  34.698  1.00 15.34      A
ATOM   1810  O   ALA A 255      24.068  16.162  35.113  1.00 14.03      A
ATOM   1811  N   ILE A 256      25.684  16.680  33.644  1.00 13.10      A
ATOM   1812  CA  ILE A 256      24.812  17.599  32.920  1.00 14.09      A
ATOM   1813  CB  ILE A 256      25.614  18.445  31.900  1.00 11.60      A
ATOM   1814  CG2 ILE A 256      24.655  19.233  30.987  1.00 13.12      A
ATOM   1815  CG1 ILE A 256      26.577  19.378  32.657  1.00  8.87      A
ATOM   1816  CD1 ILE A 256      25.878  20.335  33.703  1.00  6.00      A
ATOM   1817  C   ILE A 256      23.716  16.813  32.195  1.00 12.88      A
ATOM   1818  O   ILE A 256      22.569  17.268  32.118  1.00 12.14      A
ATOM   1819  N   SER A 257      24.069  15.639  31.678  1.00 12.01      A
```

FIGURE 5 (suite)

ATOM	1820	CA	SER	A	257	23.105	14.793	30.960	1.00	17.17	A
ATOM	1821	CB	SER	A	257	23.773	13.529	30.418	1.00	20.37	A
ATOM	1822	OG	SER	A	257	24.331	13.802	29.157	1.00	27.40	A
ATOM	1823	C	SER	A	257	21.886	14.359	31.750	1.00	21.46	A
ATOM	1824	O	SER	A	257	20.885	13.975	31.161	1.00	25.54	A
ATOM	1825	N	VAL	A	258	21.949	14.417	33.070	1.00	18.37	A
ATOM	1826	CA	VAL	A	258	20.803	13.983	33.849	1.00	22.61	A
ATOM	1827	CB	VAL	A	258	21.230	13.049	34.996	1.00	23.45	A
ATOM	1828	CG1	VAL	A	258	22.055	11.887	34.443	1.00	28.56	A
ATOM	1829	CG2	VAL	A	258	22.004	13.831	36.041	1.00	29.85	A
ATOM	1830	C	VAL	A	258	20.002	15.133	34.436	1.00	20.13	A
ATOM	1831	O	VAL	A	258	19.056	14.907	35.193	1.00	19.13	A
ATOM	1832	N	VAL	A	259	20.367	16.365	34.092	1.00	17.82	A
ATOM	1833	CA	VAL	A	259	19.628	17.503	34.621	1.00	12.10	A
ATOM	1834	CB	VAL	A	259	20.345	18.816	34.305	1.00	9.61	A
ATOM	1835	CG1	VAL	A	259	19.448	20.009	34.655	1.00	9.95	A
ATOM	1836	CG2	VAL	A	259	21.661	18.870	35.110	1.00	9.60	A
ATOM	1837	C	VAL	A	259	18.257	17.470	33.946	1.00	10.93	A
ATOM	1838	O	VAL	A	259	18.154	17.543	32.719	1.00	12.34	A
ATOM	1839	N	PRO	A	260	17.185	17.372	34.746	1.00	12.49	A
ATOM	1840	CD	PRO	A	260	17.178	17.349	36.227	1.00	15.54	A
ATOM	1841	CA	PRO	A	260	15.823	17.321	34.204	1.00	12.14	A
ATOM	1842	CB	PRO	A	260	14.992	16.881	35.415	1.00	18.68	A
ATOM	1843	CG	PRO	A	260	15.705	17.553	36.556	1.00	20.90	A
ATOM	1844	C	PRO	A	260	15.326	18.629	33.592	1.00	13.33	A
ATOM	1845	O	PRO	A	260	15.719	19.704	34.025	1.00	11.59	A
ATOM	1846	N	LEU	A	261	14.462	18.517	32.583	1.00	10.89	A
ATOM	1847	CA	LEU	A	261	13.906	19.697	31.899	1.00	14.89	A
ATOM	1848	CB	LEU	A	261	13.190	19.272	30.612	1.00	14.36	A
ATOM	1849	CG	LEU	A	261	14.033	18.724	29.470	1.00	23.33	A
ATOM	1850	CD1	LEU	A	261	13.132	18.115	28.388	1.00	17.91	A
ATOM	1851	CD2	LEU	A	261	14.860	19.854	28.927	1.00	21.86	A
ATOM	1852	C	LEU	A	261	12.868	20.354	32.782	1.00	14.14	A
ATOM	1853	O	LEU	A	261	12.313	19.715	33.667	1.00	13.00	A
ATOM	1854	N	PRO	A	262	12.598	21.646	32.570	1.00	16.56	A
ATOM	1855	CD	PRO	A	262	13.154	22.620	31.613	1.00	18.10	A
ATOM	1856	CA	PRO	A	262	11.576	22.260	33.421	1.00	16.86	A
ATOM	1857	CB	PRO	A	262	11.753	23.752	33.137	1.00	16.37	A
ATOM	1858	CG	PRO	A	262	12.147	23.764	31.698	1.00	22.55	A
ATOM	1859	C	PRO	A	262	10.239	21.709	32.911	1.00	14.68	A
ATOM	1860	O	PRO	A	262	10.136	21.357	31.743	1.00	14.32	A
ATOM	1861	N	ALA	A	263	9.234	21.605	33.776	1.00	13.42	A
ATOM	1862	CA	ALA	A	263	7.943	21.085	33.344	1.00	16.60	A
ATOM	1863	CB	ALA	A	263	6.994	20.952	34.539	1.00	20.02	A
ATOM	1864	C	ALA	A	263	7.343	22.011	32.292	1.00	16.04	A
ATOM	1865	O	ALA	A	263	7.480	23.235	32.377	1.00	14.70	A
ATOM	1866	N	ALA	A	264	6.664	21.426	31.309	1.00	15.42	A
ATOM	1867	CA	ALA	A	264	6.050	22.206	30.239	1.00	12.74	A
ATOM	1868	CB	ALA	A	264	5.248	21.287	29.308	1.00	19.88	A
ATOM	1869	C	ALA	A	264	5.149	23.329	30.747	1.00	15.82	A
ATOM	1870	O	ALA	A	264	5.247	24.461	30.264	1.00	17.34	A
ATOM	1871	N	ALA	A	265	4.284	23.037	31.721	1.00	13.78	A
ATOM	1872	CA	ALA	A	265	3.370	24.071	32.242	1.00	15.17	A
ATOM	1873	CB	ALA	A	265	2.464	23.478	33.363	1.00	15.42	A
ATOM	1874	C	ALA	A	265	4.057	25.333	32.772	1.00	15.06	A
ATOM	1875	O	ALA	A	265	3.437	26.398	32.838	1.00	13.78	A
ATOM	1876	N	ASN	A	266	5.320	25.212	33.175	1.00	13.85	A
ATOM	1877	CA	ASN	A	266	6.057	26.343	33.733	1.00	12.11	A
ATOM	1878	CB	ASN	A	266	6.987	25.895	34.873	1.00	13.94	A
ATOM	1879	CG	ASN	A	266	6.253	25.239	36.028	1.00	23.25	A
ATOM	1880	OD1	ASN	A	266	5.175	25.676	36.425	1.00	21.92	A
ATOM	1881	ND2	ASN	A	266	6.856	24.200	36.592	1.00	19.37	A
ATOM	1882	C	ASN	A	266	6.969	27.039	32.730	1.00	12.06	A
ATOM	1883	O	ASN	A	266	7.662	27.965	33.100	1.00	13.88	A
ATOM	1884	N	ARG	A	267	6.980	26.600	31.483	1.00	10.11	A
ATOM	1885	CA	ARG	A	267	7.933	27.162	30.534	1.00	12.44	A
ATOM	1886	CB	ARG	A	267	8.029	26.254	29.306	1.00	10.57	A
ATOM	1887	CG	ARG	A	267	8.746	24.945	29.675	1.00	12.04	A
ATOM	1888	CD	ARG	A	267	8.892	23.924	28.540	1.00	9.95	A
ATOM	1889	NE	ARG	A	267	9.275	22.637	29.124	1.00	14.76	A
ATOM	1890	CZ	ARG	A	267	9.533	21.530	28.439	1.00	14.94	A
ATOM	1891	NH1	ARG	A	267	9.477	21.543	27.118	1.00	16.59	A
ATOM	1892	NH2	ARG	A	267	9.782	20.387	29.084	1.00	12.17	A
ATOM	1893	C	ARG	A	267	7.785	28.629	30.168	1.00	13.15	A
ATOM	1894	O	ARG	A	267	8.658	29.207	29.505	1.00	13.32	A
ATOM	1895	N	GLY	A	268	6.711	29.240	30.663	1.00	11.13	A

FIGURE 5 (suite)

```
ATOM   1896  CA  GLY A 268       6.491  30.653  30.439  1.00 13.33      A
ATOM   1897  C   GLY A 268       7.212  31.457  31.507  1.00 13.92      A
ATOM   1898  O   GLY A 268       7.219  32.679  31.452  1.00 14.39      A
ATOM   1899  N   ASP A 269       7.804  30.767  32.486  1.00 11.00      A
ATOM   1900  CA  ASP A 269       8.554  31.398  33.594  1.00 14.58      A
ATOM   1901  CB  ASP A 269       8.233  30.665  34.914  1.00 13.17      A
ATOM   1902  CG  ASP A 269       8.943  31.263  36.117  1.00 16.24      A
ATOM   1903  OD1 ASP A 269       9.767  32.179  35.944  1.00 17.40      A
ATOM   1904  OD2 ASP A 269       8.667  30.804  37.244  1.00 19.44      A
ATOM   1905  C   ASP A 269      10.064  31.290  33.303  1.00 10.72      A
ATOM   1906  O   ASP A 269      10.616  30.196  33.348  1.00 11.39      A
ATOM   1907  N   PRO A 270      10.742  32.417  33.010  1.00 11.52      A
ATOM   1908  CD  PRO A 270      10.217  33.796  32.924  1.00 11.48      A
ATOM   1909  CA  PRO A 270      12.184  32.394  32.709  1.00 10.44      A
ATOM   1910  CB  PRO A 270      12.523  33.867  32.491  1.00 11.04      A
ATOM   1911  CG  PRO A 270      11.225  34.465  32.026  1.00 13.30      A
ATOM   1912  C   PRO A 270      13.042  31.786  33.793  1.00 12.77      A
ATOM   1913  O   PRO A 270      14.097  31.243  33.521  1.00 10.58      A
ATOM   1914  N   ASN A 271      12.578  31.870  35.032  1.00 11.41      A
ATOM   1915  CA  ASN A 271      13.337  31.332  36.145  1.00 11.19      A
ATOM   1916  CB  ASN A 271      12.660  31.729  37.463  1.00 14.43      A
ATOM   1917  CG  ASN A 271      13.533  31.434  38.683  1.00 22.14      A
ATOM   1918  OD1 ASN A 271      14.734  31.726  38.696  1.00 16.89      A
ATOM   1919  ND2 ASN A 271      12.934  30.854  39.703  1.00 16.43      A
ATOM   1920  C   ASN A 271      13.545  29.816  36.090  1.00 16.21      A
ATOM   1921  O   ASN A 271      14.595  29.319  36.510  1.00 15.74      A
ATOM   1922  N   VAL A 272      12.574  29.065  35.575  1.00 10.21      A
ATOM   1923  CA  VAL A 272      12.749  27.613  35.547  1.00 11.32      A
ATOM   1924  CB  VAL A 272      11.378  26.849  35.440  1.00 13.38      A
ATOM   1925  CG1 VAL A 272      10.450  27.297  36.548  1.00 14.31      A
ATOM   1926  CG2 VAL A 272      10.759  27.074  34.078  1.00 11.03      A
ATOM   1927  C   VAL A 272      13.651  27.086  34.434  1.00 12.71      A
ATOM   1928  O   VAL A 272      14.028  25.907  34.459  1.00 10.89      A
ATOM   1929  N   TRP A 273      13.991  27.930  33.461  1.00  7.57      A
ATOM   1930  CA  TRP A 273      14.862  27.465  32.366  1.00  7.83      A
ATOM   1931  CB  TRP A 273      14.741  28.403  31.150  1.00  7.08      A
ATOM   1932  CG  TRP A 273      13.496  28.126  30.364  1.00 10.87      A
ATOM   1933  CD2 TRP A 273      13.359  27.161  29.325  1.00  9.80      A
ATOM   1934  CE2 TRP A 273      12.020  27.228  28.860  1.00  9.21      A
ATOM   1935  CE3 TRP A 273      14.241  26.240  28.732  1.00 10.74      A
ATOM   1936  CD1 TRP A 273      12.271  28.728  30.500  1.00  7.74      A
ATOM   1937  NE1 TRP A 273      11.375  28.192  29.590  1.00 12.31      A
ATOM   1938  CZ2 TRP A 273      11.545  26.412  27.838  1.00 10.97      A
ATOM   1939  CZ3 TRP A 273      13.764  25.428  27.700  1.00 10.91      A
ATOM   1940  CH2 TRP A 273      12.427  25.522  27.267  1.00 14.13      A
ATOM   1941  C   TRP A 273      16.338  27.311  32.755  1.00  9.26      A
ATOM   1942  O   TRP A 273      17.119  26.663  32.042  1.00  9.73      A
ATOM   1943  N   THR A 274      16.736  27.893  33.880  1.00  8.74      A
ATOM   1944  CA  THR A 274      18.123  27.769  34.281  1.00 11.71      A
ATOM   1945  CB  THR A 274      18.759  29.147  34.542  1.00 12.87      A
ATOM   1946  OG1 THR A 274      18.701  29.940  33.334  1.00 16.61      A
ATOM   1947  CG2 THR A 274      20.240  28.973  34.959  1.00  9.96      A
ATOM   1948  C   THR A 274      18.271  26.918  35.535  1.00 10.53      A
ATOM   1949  O   THR A 274      18.020  27.378  36.645  1.00 11.96      A
ATOM   1950  N   PRO A 275      18.673  25.657  35.373  1.00 11.80      A
ATOM   1951  CD  PRO A 275      18.885  24.916  34.119  1.00 13.30      A
ATOM   1952  CA  PRO A 275      18.841  24.782  36.543  1.00 11.14      A
ATOM   1953  CB  PRO A 275      19.180  23.424  35.921  1.00 15.21      A
ATOM   1954  CG  PRO A 275      18.600  23.506  34.528  1.00 15.39      A
ATOM   1955  C   PRO A 275      20.004  25.253  37.445  1.00 12.51      A
ATOM   1956  O   PRO A 275      21.007  25.723  36.950  1.00 12.15      A
ATOM   1957  N   VAL A 276      19.869  25.148  38.764  1.00  9.91      A
ATOM   1958  CA  VAL A 276      20.999  25.502  39.615  1.00 10.08      A
ATOM   1959  CB  VAL A 276      20.738  26.762  40.478  1.00 15.02      A
ATOM   1960  CG1 VAL A 276      20.534  27.990  39.568  1.00 16.57      A
ATOM   1961  CG2 VAL A 276      19.551  26.543  41.388  1.00 17.45      A
ATOM   1962  C   VAL A 276      21.236  24.293  40.500  1.00 12.75      A
ATOM   1963  O   VAL A 276      20.315  23.498  40.743  1.00  7.21      A
ATOM   1964  N   PHE A 277      22.472  24.149  40.969  1.00 13.38      A
ATOM   1965  CA  PHE A 277      22.848  23.017  41.798  1.00 12.43      A
ATOM   1966  CB  PHE A 277      24.231  22.491  41.373  1.00  8.49      A
ATOM   1967  CG  PHE A 277      24.229  21.828  40.017  1.00  8.19      A
ATOM   1968  CD1 PHE A 277      24.404  22.568  38.858  1.00  9.76      A
ATOM   1969  CD2 PHE A 277      23.999  20.461  39.909  1.00  8.15      A
ATOM   1970  CE1 PHE A 277      24.350  21.934  37.585  1.00 13.41      A
ATOM   1971  CE2 PHE A 277      23.938  19.825  38.654  1.00 13.62      A
```

FIGURE 5 (suite)

ATOM	1972	CZ	PHE	A	277	24.114	20.555	37.499	1.00	8.74	A
ATOM	1973	C	PHE	A	277	22.848	23.377	43.272	1.00	12.19	A
ATOM	1974	O	PHE	A	277	22.892	24.553	43.634	1.00	12.80	A
ATOM	1975	N	GLY	A	278	22.781	22.356	44.116	1.00	12.01	A
ATOM	1976	CA	GLY	A	278	22.767	22.601	45.547	1.00	10.29	A
ATOM	1977	C	GLY	A	278	23.113	21.342	46.309	1.00	9.39	A
ATOM	1978	O	GLY	A	278	23.379	20.302	45.704	1.00	12.45	A
ATOM	1979	N	ALA	A	279	23.087	21.414	47.637	1.00	11.15	A
ATOM	1980	CA	ALA	A	279	23.436	20.246	48.450	1.00	14.32	A
ATOM	1981	CB	ALA	A	279	23.362	20.604	49.930	1.00	16.91	A
ATOM	1982	C	ALA	A	279	22.542	19.029	48.157	1.00	20.18	A
ATOM	1983	O	ALA	A	279	23.038	17.896	48.017	1.00	18.69	A
ATOM	1984	N	VAL	A	280	21.238	19.262	48.040	1.00	14.35	A
ATOM	1985	CA	VAL	A	280	20.302	18.176	47.796	1.00	19.81	A
ATOM	1986	CB	VAL	A	280	19.500	17.847	49.076	1.00	23.28	A
ATOM	1987	CG1	VAL	A	280	20.457	17.579	50.225	1.00	23.97	A
ATOM	1988	CG2	VAL	A	280	18.603	18.992	49.436	1.00	21.87	A
ATOM	1989	C	VAL	A	280	19.311	18.483	46.686	1.00	20.63	A
ATOM	1990	O	VAL	A	280	19.004	19.635	46.407	1.00	21.63	A
ATOM	1991	N	THR	A	281	18.812	17.436	46.055	1.00	20.03	A
ATOM	1992	CA	THR	A	281	17.838	17.599	44.982	1.00	19.32	A
ATOM	1993	CB	THR	A	281	17.732	16.327	44.136	1.00	20.70	A
ATOM	1994	OG1	THR	A	281	18.989	16.096	43.493	1.00	24.83	A
ATOM	1995	CG2	THR	A	281	16.637	16.473	43.062	1.00	20.23	A
ATOM	1996	C	THR	A	281	16.500	17.882	45.618	1.00	24.45	A
ATOM	1997	O	THR	A	281	16.073	17.159	46.520	1.00	22.56	A
ATOM	1998	N	GLY	A	282	15.854	18.949	45.164	1.00	22.37	A
ATOM	1999	CA	GLY	A	282	14.564	19.316	45.706	1.00	26.62	A
ATOM	2000	C	GLY	A	282	14.183	20.735	45.343	1.00	31.11	A
ATOM	2001	O	GLY	A	282	15.048	21.603	45.206	1.00	27.54	A
ATOM	2002	N	GLY	A	283	12.883	20.971	45.181	1.00	32.42	A
ATOM	2003	CA	GLY	A	283	12.401	22.301	44.855	1.00	30.56	A
ATOM	2004	C	GLY	A	283	13.051	22.950	43.654	1.00	30.47	A
ATOM	2005	O	GLY	A	283	13.307	24.154	43.666	1.00	33.57	A
ATOM	2006	N	GLY	A	284	13.298	22.171	42.607	1.00	26.82	A
ATOM	2007	CA	GLY	A	284	13.925	22.723	41.415	1.00	26.01	A
ATOM	2008	C	GLY	A	284	15.450	22.687	41.439	1.00	26.04	A
ATOM	2009	O	GLY	A	284	16.115	22.822	40.406	1.00	25.82	A
ATOM	2010	N	VAL	A	285	16.022	22.521	42.622	1.00	19.46	A
ATOM	2011	CA	VAL	A	285	17.467	22.461	42.722	1.00	19.85	A
ATOM	2012	CB	VAL	A	285	17.903	22.894	44.135	1.00	19.90	A
ATOM	2013	CG1	VAL	A	285	19.389	22.673	44.319	1.00	16.38	A
ATOM	2014	CG2	VAL	A	285	17.521	24.376	44.360	1.00	20.29	A
ATOM	2015	C	VAL	A	285	17.958	21.037	42.428	1.00	18.72	A
ATOM	2016	O	VAL	A	285	17.298	20.055	42.794	1.00	18.51	A
ATOM	2017	N	VAL	A	286	19.103	20.932	41.755	1.00	14.01	A
ATOM	2018	CA	VAL	A	286	19.706	19.645	41.423	1.00	16.59	A
ATOM	2019	CB	VAL	A	286	20.200	19.625	39.964	1.00	14.25	A
ATOM	2020	CG1	VAL	A	286	20.729	18.254	39.623	1.00	19.16	A
ATOM	2021	CG2	VAL	A	286	19.068	19.997	39.036	1.00	20.67	A
ATOM	2022	C	VAL	A	286	20.917	19.416	42.325	1.00	17.27	A
ATOM	2023	O	VAL	A	286	21.757	20.302	42.484	1.00	13.49	A
ATOM	2024	N	ALA	A	287	21.041	18.229	42.896	1.00	15.01	A
ATOM	2025	CA	ALA	A	287	22.188	18.000	43.778	1.00	17.78	A
ATOM	2026	CB	ALA	A	287	22.039	16.649	44.527	1.00	16.62	A
ATOM	2027	C	ALA	A	287	23.483	18.011	42.999	1.00	12.88	A
ATOM	2028	O	ALA	A	287	23.520	17.533	41.854	1.00	10.29	A
ATOM	2029	N	TYR	A	288	24.538	18.576	43.603	1.00	11.08	A
ATOM	2030	CA	TYR	A	288	25.867	18.554	42.979	1.00	8.88	A
ATOM	2031	CB	TYR	A	288	26.877	19.297	43.862	1.00	12.41	A
ATOM	2032	CG	TYR	A	288	26.891	20.803	43.649	1.00	9.59	A
ATOM	2033	CD1	TYR	A	288	26.329	21.677	44.589	1.00	8.82	A
ATOM	2034	CE1	TYR	A	288	26.320	23.086	44.382	1.00	10.11	A
ATOM	2035	CD2	TYR	A	288	27.463	21.356	42.491	1.00	10.87	A
ATOM	2036	CE2	TYR	A	288	27.464	22.744	42.275	1.00	6.63	A
ATOM	2037	CZ	TYR	A	288	26.883	23.601	43.223	1.00	7.60	A
ATOM	2038	OH	TYR	A	288	26.842	24.960	42.960	1.00	7.46	A
ATOM	2039	C	TYR	A	288	26.263	17.061	42.851	1.00	12.67	A
ATOM	2040	O	TYR	A	288	25.989	16.265	43.750	1.00	10.55	A
ATOM	2041	N	PRO	A	289	26.929	16.672	41.746	1.00	12.61	A
ATOM	2042	CD	PRO	A	289	27.338	17.560	40.625	1.00	13.50	A
ATOM	2043	CA	PRO	A	289	27.346	15.280	41.495	1.00	12.99	A
ATOM	2044	CB	PRO	A	289	27.863	15.328	40.051	1.00	15.51	A
ATOM	2045	CG	PRO	A	289	28.424	16.734	39.920	1.00	10.53	A
ATOM	2046	C	PRO	A	289	28.366	14.644	42.439	1.00	17.46	A
ATOM	2047	O	PRO	A	289	29.342	15.282	42.835	1.00	15.29	A

FIGURE 5 (suite)

```
ATOM   2048  N   ASP A 290      28.149  13.372  42.782  1.00 16.57      A
ATOM   2049  CA  ASP A 290      29.092  12.691  43.652  1.00 20.97      A
ATOM   2050  CB  ASP A 290      28.360  11.751  44.628  1.00 25.52      A
ATOM   2051  CG  ASP A 290      27.489  10.723  43.929  1.00 34.64      A
ATOM   2052  OD1 ASP A 290      26.599  10.146  44.604  1.00 38.07      A
ATOM   2053  OD2 ASP A 290      27.693  10.478  42.716  1.00 39.24      A
ATOM   2054  C   ASP A 290      30.154  11.952  42.824  1.00 21.23      A
ATOM   2055  O   ASP A 290      30.990  11.231  43.362  1.00 21.11      A
ATOM   2056  N   SER A 291      30.136  12.152  41.509  1.00 14.24      A
ATOM   2057  CA  SER A 291      31.143  11.538  40.645  1.00 16.28      A
ATOM   2058  CB  SER A 291      30.592  10.290  39.925  1.00 16.14      A
ATOM   2059  OG  SER A 291      29.549  10.625  39.031  1.00 22.17      A
ATOM   2060  C   SER A 291      31.555  12.609  39.643  1.00 14.75      A
ATOM   2061  O   SER A 291      30.842  13.605  39.493  1.00 13.50      A
ATOM   2062  N   GLY A 292      32.692  12.419  38.971  1.00 13.79      A
ATOM   2063  CA  GLY A 292      33.181  13.423  38.019  1.00 14.60      A
ATOM   2064  C   GLY A 292      33.713  14.688  38.707  1.00 11.05      A
ATOM   2065  O   GLY A 292      33.964  14.669  39.909  1.00 14.10      A
ATOM   2066  N   TYR A 293      33.904  15.779  37.955  1.00 10.56      A
ATOM   2067  CA  TYR A 293      34.380  17.049  38.529  1.00  9.23      A
ATOM   2068  CB  TYR A 293      34.838  18.014  37.443  1.00 10.30      A
ATOM   2069  CG  TYR A 293      35.535  19.229  38.012  1.00 11.13      A
ATOM   2070  CD1 TYR A 293      36.829  19.138  38.526  1.00  7.85      A
ATOM   2071  CE1 TYR A 293      37.482  20.269  39.049  1.00  8.64      A
ATOM   2072  CD2 TYR A 293      34.900  20.470  38.038  1.00 11.82      A
ATOM   2073  CE2 TYR A 293      35.547  21.601  38.554  1.00 11.43      A
ATOM   2074  CZ  TYR A 293      36.839  21.488  39.052  1.00  8.40      A
ATOM   2075  OH  TYR A 293      37.488  22.625  39.496  1.00  8.49      A
ATOM   2076  C   TYR A 293      33.183  17.645  39.252  1.00  9.71      A
ATOM   2077  O   TYR A 293      32.142  17.834  38.657  1.00 12.02      A
ATOM   2078  N   PRO A 294      33.347  18.021  40.531  1.00 12.25      A
ATOM   2079  CD  PRO A 294      34.575  17.923  41.350  1.00 12.44      A
ATOM   2080  CA  PRO A 294      32.229  18.559  41.302  1.00 14.24      A
ATOM   2081  CB  PRO A 294      32.644  18.263  42.748  1.00 12.15      A
ATOM   2082  CG  PRO A 294      34.132  18.499  42.712  1.00 15.49      A
ATOM   2083  C   PRO A 294      31.682  19.963  41.133  1.00 13.85      A
ATOM   2084  O   PRO A 294      30.511  20.171  41.429  1.00 11.37      A
ATOM   2085  N   ILE A 295      32.476  20.907  40.628  1.00 10.88      A
ATOM   2086  CA  ILE A 295      31.990  22.280  40.510  1.00  9.12      A
ATOM   2087  CB  ILE A 295      33.062  23.301  40.934  1.00 10.07      A
ATOM   2088  CG2 ILE A 295      32.375  24.666  41.232  1.00 10.52      A
ATOM   2089  CG1 ILE A 295      33.733  22.853  42.236  1.00 12.06      A
ATOM   2090  CD1 ILE A 295      34.841  23.801  42.703  1.00 12.46      A
ATOM   2091  C   ILE A 295      31.564  22.574  39.087  1.00 12.87      A
ATOM   2092  O   ILE A 295      32.397  22.660  38.182  1.00 10.57      A
ATOM   2093  N   LEU A 296      30.257  22.743  38.902  1.00 10.82      A
ATOM   2094  CA  LEU A 296      29.703  22.951  37.570  1.00  8.61      A
ATOM   2095  CB  LEU A 296      29.370  21.578  36.949  1.00  9.63      A
ATOM   2096  CG  LEU A 296      28.032  20.884  37.276  1.00  7.75      A
ATOM   2097  CD1 LEU A 296      27.971  19.517  36.572  1.00 11.60      A
ATOM   2098  CD2 LEU A 296      27.852  20.690  38.784  1.00 10.20      A
ATOM   2099  C   LEU A 296      28.461  23.828  37.612  1.00  7.00      A
ATOM   2100  O   LEU A 296      27.945  24.137  38.690  1.00 11.47      A
ATOM   2101  N   GLY A 297      27.988  24.236  36.436  1.00  8.98      A
ATOM   2102  CA  GLY A 297      26.812  25.093  36.353  1.00  8.75      A
ATOM   2103  C   GLY A 297      26.503  25.452  34.906  1.00 14.03      A
ATOM   2104  O   GLY A 297      27.128  24.917  33.979  1.00  9.23      A
ATOM   2105  N   PHE A 298      25.544  26.353  34.700  1.00  7.40      A
ATOM   2106  CA  PHE A 298      25.177  26.758  33.350  1.00  7.84      A
ATOM   2107  CB  PHE A 298      23.666  26.550  33.105  1.00  6.30      A
ATOM   2108  CG  PHE A 298      23.249  25.102  32.984  1.00 10.10      A
ATOM   2109  CD1 PHE A 298      22.775  24.398  34.094  1.00  9.62      A
ATOM   2110  CD2 PHE A 298      23.356  24.444  31.763  1.00  8.37      A
ATOM   2111  CE1 PHE A 298      22.414  23.038  33.988  1.00 13.84      A
ATOM   2112  CE2 PHE A 298      23.005  23.087  31.630  1.00  7.19      A
ATOM   2113  CZ  PHE A 298      22.533  22.379  32.747  1.00 12.00      A
ATOM   2114  C   PHE A 298      25.469  28.235  33.145  1.00 10.22      A
ATOM   2115  O   PHE A 298      25.431  29.007  34.114  1.00  9.27      A
ATOM   2116  N   THR A 299      25.811  28.615  31.910  1.00  7.04      A
ATOM   2117  CA  THR A 299      25.961  30.029  31.594  1.00  8.99      A
ATOM   2118  CB  THR A 299      27.319  30.414  30.975  1.00 12.65      A
ATOM   2119  OG1 THR A 299      27.293  31.818  30.682  1.00 10.67      A
ATOM   2120  CG2 THR A 299      27.616  29.617  29.740  1.00 12.18      A
ATOM   2121  C   THR A 299      24.798  30.220  30.616  1.00  8.12      A
ATOM   2122  O   THR A 299      24.482  29.325  29.810  1.00  9.48      A
ATOM   2123  N   ASP A 300      24.173  31.392  30.677  1.00  8.49      A
```

FIGURE 5 (suite)

ATOM	2124	CA	ASP	A	300	22.930	31.636	29.950	1.00	10.66	A
ATOM	2125	CB	ASP	A	300	21.849	31.816	31.023	1.00	8.23	A
ATOM	2126	CG	ASP	A	300	22.055	30.877	32.193	1.00	14.11	A
ATOM	2127	OD1	ASP	A	300	22.141	29.660	31.928	1.00	8.23	A
ATOM	2128	OD2	ASP	A	300	22.149	31.341	33.373	1.00	15.65	A
ATOM	2129	C	ASP	A	300	22.828	32.790	28.975	1.00	10.65	A
ATOM	2130	O	ASP	A	300	23.690	33.669	28.931	1.00	8.49	A
ATOM	2131	N	LEU	A	301	21.740	32.765	28.202	1.00	8.77	A
ATOM	2132	CA	LEU	A	301	21.407	33.819	27.246	1.00	10.49	A
ATOM	2133	CB	LEU	A	301	21.121	33.226	25.850	1.00	10.57	A
ATOM	2134	CG	LEU	A	301	22.189	32.371	25.157	1.00	17.61	A
ATOM	2135	CD1	LEU	A	301	21.699	31.951	23.775	1.00	16.46	A
ATOM	2136	CD2	LEU	A	301	23.456	33.151	25.057	1.00	12.96	A
ATOM	2137	C	LEU	A	301	20.128	34.533	27.689	1.00	7.85	A
ATOM	2138	O	LEU	A	301	19.179	33.889	28.127	1.00	7.63	A
ATOM	2139	N	ILE	A	302	20.101	35.855	27.564	1.00	8.91	A
ATOM	2140	CA	ILE	A	302	18.897	36.614	27.879	1.00	7.82	A
ATOM	2141	CB	ILE	A	302	19.146	37.648	29.000	1.00	10.36	A
ATOM	2142	CG2	ILE	A	302	17.848	38.429	29.261	1.00	12.51	A
ATOM	2143	CG1	ILE	A	302	19.588	36.918	30.287	1.00	8.81	A
ATOM	2144	CD1	ILE	A	302	20.089	37.867	31.411	1.00	7.82	A
ATOM	2145	C	ILE	A	302	18.517	37.368	26.602	1.00	9.48	A
ATOM	2146	O	ILE	A	302	19.320	38.158	26.096	1.00	8.44	A
ATOM	2147	N	PHE	A	303	17.311	37.120	26.081	1.00	8.80	A
ATOM	2148	CA	PHE	A	303	16.843	37.786	24.854	1.00	8.37	A
ATOM	2149	CB	PHE	A	303	16.751	36.821	23.651	1.00	7.07	A
ATOM	2150	CG	PHE	A	303	18.054	36.583	22.944	1.00	8.30	A
ATOM	2151	CD1	PHE	A	303	19.027	35.770	23.500	1.00	8.48	A
ATOM	2152	CD2	PHE	A	303	18.316	37.205	21.725	1.00	7.08	A
ATOM	2153	CE1	PHE	A	303	20.265	35.582	22.851	1.00	7.30	A
ATOM	2154	CE2	PHE	A	303	19.559	37.023	21.065	1.00	9.28	A
ATOM	2155	CZ	PHE	A	303	20.528	36.210	21.637	1.00	11.64	A
ATOM	2156	C	PHE	A	303	15.437	38.305	25.032	1.00	9.03	A
ATOM	2157	O	PHE	A	303	14.797	38.052	26.031	1.00	9.30	A
ATOM	2158	N	SER	A	304	14.947	39.002	24.014	1.00	7.56	A
ATOM	2159	CA	SER	A	304	13.566	39.465	24.044	1.00	9.72	A
ATOM	2160	CB	SER	A	304	13.470	40.870	23.444	1.00	11.08	A
ATOM	2161	OG	SER	A	304	12.117	41.291	23.498	1.00	10.08	A
ATOM	2162	C	SER	A	304	12.707	38.530	23.170	1.00	6.80	A
ATOM	2163	O	SER	A	304	13.198	38.018	22.162	1.00	10.90	A
ATOM	2164	N	GLU	A	305	11.451	38.293	23.534	1.00	8.14	A
ATOM	2165	CA	GLU	A	305	10.605	37.482	22.655	1.00	11.11	A
ATOM	2166	CB	GLU	A	305	9.268	37.125	23.316	1.00	10.66	A
ATOM	2167	CG	GLU	A	305	8.447	36.161	22.439	1.00	11.71	A
ATOM	2168	CD	GLU	A	305	7.073	35.820	22.985	1.00	12.77	A
ATOM	2169	OE1	GLU	A	305	6.767	36.154	24.147	1.00	14.12	A
ATOM	2170	OE2	GLU	A	305	6.288	35.192	22.228	1.00	16.70	A
ATOM	2171	C	GLU	A	305	10.305	38.329	21.399	1.00	15.34	A
ATOM	2172	O	GLU	A	305	10.154	37.800	20.283	1.00	10.74	A
ATOM	2173	N	CYS	A	306	10.239	39.649	21.574	1.00	11.86	A
ATOM	2174	CA	CYS	A	306	9.889	40.534	20.450	1.00	12.96	A
ATOM	2175	C	CYS	A	306	10.859	41.666	20.140	1.00	14.14	A
ATOM	2176	O	CYS	A	306	11.434	42.270	21.046	1.00	11.98	A
ATOM	2177	CB	CYS	A	306	8.531	41.185	20.726	1.00	11.40	A
ATOM	2178	SG	CYS	A	306	7.188	40.111	21.313	1.00	15.63	A
ATOM	2179	N	TYR	A	307	11.017	41.956	18.854	1.00	12.82	A
ATOM	2180	CA	TYR	A	307	11.872	43.060	18.397	1.00	10.85	A
ATOM	2181	CB	TYR	A	307	13.143	42.533	17.712	1.00	8.88	A
ATOM	2182	CG	TYR	A	307	14.066	41.850	18.703	1.00	13.96	A
ATOM	2183	CD1	TYR	A	307	13.902	40.499	19.020	1.00	13.44	A
ATOM	2184	CE1	TYR	A	307	14.683	39.882	20.020	1.00	13.43	A
ATOM	2185	CD2	TYR	A	307	15.035	42.579	19.401	1.00	11.32	A
ATOM	2186	CE2	TYR	A	307	15.821	41.972	20.410	1.00	11.99	A
ATOM	2187	CZ	TYR	A	307	15.637	40.625	20.712	1.00	12.10	A
ATOM	2188	OH	TYR	A	307	16.379	40.019	21.724	1.00	12.32	A
ATOM	2189	C	TYR	A	307	11.056	43.908	17.424	1.00	13.04	A
ATOM	2190	O	TYR	A	307	10.318	43.370	16.588	1.00	11.71	A
ATOM	2191	N	ALA	A	308	11.161	45.229	17.546	1.00	13.47	A
ATOM	2192	CA	ALA	A	308	10.420	46.123	16.660	1.00	19.16	A
ATOM	2193	CB	ALA	A	308	10.623	47.583	17.116	1.00	19.39	A
ATOM	2194	C	ALA	A	308	10.827	45.960	15.176	1.00	16.58	A
ATOM	2195	O	ALA	A	308	9.990	46.011	14.290	1.00	15.94	A
ATOM	2196	N	ASN	A	309	12.109	45.752	14.919	1.00	16.56	A
ATOM	2197	CA	ASN	A	309	12.621	45.602	13.565	1.00	15.71	A
ATOM	2198	CB	ASN	A	309	14.084	46.052	13.558	1.00	11.74	A
ATOM	2199	CG	ASN	A	309	14.704	46.002	12.183	1.00	20.62	A

FIGURE 5 (suite)

ATOM	2200	OD1	ASN	A	309	15.130	44.946	11.713	1.00	17.26	A
ATOM	2201	ND2	ASN	A	309	14.741	47.153	11.517	1.00	13.84	A
ATOM	2202	C	ASN	A	309	12.493	44.142	13.066	1.00	16.39	A
ATOM	2203	O	ASN	A	309	13.031	43.221	13.678	1.00	11.54	A
ATOM	2204	N	ALA	A	310	11.806	43.942	11.941	1.00	12.69	A
ATOM	2205	CA	ALA	A	310	11.583	42.584	11.430	1.00	16.06	A
ATOM	2206	CB	ALA	A	310	10.564	42.618	10.281	1.00	16.44	A
ATOM	2207	C	ALA	A	310	12.836	41.828	10.997	1.00	14.76	A
ATOM	2208	O	ALA	A	310	12.907	40.599	11.128	1.00	15.90	A
ATOM	2209	N	THR	A	311	13.827	42.546	10.485	1.00	13.61	A
ATOM	2210	CA	THR	A	311	15.074	41.922	10.069	1.00	14.28	A
ATOM	2211	CB	THR	A	311	15.949	42.927	9.314	1.00	15.47	A
ATOM	2212	OG1	THR	A	311	15.284	43.307	8.097	1.00	18.10	A
ATOM	2213	CG2	THR	A	311	17.291	42.322	8.977	1.00	16.40	A
ATOM	2214	C	THR	A	311	15.813	41.407	11.324	1.00	15.00	A
ATOM	2215	O	THR	A	311	16.371	40.313	11.318	1.00	12.29	A
ATOM	2216	N	GLN	A	312	15.798	42.180	12.409	1.00	13.08	A
ATOM	2217	CA	GLN	A	312	16.477	41.717	13.623	1.00	12.35	A
ATOM	2218	CB	GLN	A	312	16.545	42.827	14.682	1.00	10.08	A
ATOM	2219	CG	GLN	A	312	17.501	43.960	14.273	1.00	7.89	A
ATOM	2220	CD	GLN	A	312	17.696	44.997	15.377	1.00	13.93	A
ATOM	2221	OE1	GLN	A	312	16.897	45.087	16.311	1.00	14.28	A
ATOM	2222	NE2	GLN	A	312	18.743	45.799	15.255	1.00	16.18	A
ATOM	2223	C	GLN	A	312	15.768	40.486	14.191	1.00	11.19	A
ATOM	2224	O	GLN	A	312	16.418	39.537	14.639	1.00	14.09	A
ATOM	2225	N	THR	A	313	14.439	40.507	14.189	1.00	9.72	A
ATOM	2226	CA	THR	A	313	13.670	39.363	14.685	1.00	8.88	A
ATOM	2227	CB	THR	A	313	12.149	39.541	14.449	1.00	13.95	A
ATOM	2228	OG1	THR	A	313	11.660	40.660	15.197	1.00	14.46	A
ATOM	2229	CG2	THR	A	313	11.398	38.288	14.882	1.00	12.76	A
ATOM	2230	C	THR	A	313	14.108	38.096	13.935	1.00	10.80	A
ATOM	2231	O	THR	A	313	14.318	37.042	14.538	1.00	11.41	A
ATOM	2232	N	GLY	A	314	14.218	38.204	12.615	1.00	11.55	A
ATOM	2233	CA	GLY	A	314	14.628	37.067	11.810	1.00	12.96	A
ATOM	2234	C	GLY	A	314	16.060	36.638	12.090	1.00	10.31	A
ATOM	2235	O	GLY	A	314	16.370	35.439	12.111	1.00	11.80	A
ATOM	2236	N	GLN	A	315	16.952	37.603	12.291	1.00	10.00	A
ATOM	2237	CA	GLN	A	315	18.360	37.280	12.586	1.00	10.98	A
ATOM	2238	CB	GLN	A	315	19.219	38.542	12.512	1.00	12.34	A
ATOM	2239	CG	GLN	A	315	19.286	39.069	11.071	1.00	13.86	A
ATOM	2240	CD	GLN	A	315	20.014	40.385	10.958	1.00	16.05	A
ATOM	2241	OE1	GLN	A	315	19.868	41.254	11.818	1.00	15.65	A
ATOM	2242	NE2	GLN	A	315	20.787	40.552	9.880	1.00	15.34	A
ATOM	2243	C	GLN	A	315	18.518	36.613	13.952	1.00	11.33	A
ATOM	2244	O	GLN	A	315	19.385	35.743	14.136	1.00	12.86	A
ATOM	2245	N	VAL	A	316	17.677	37.006	14.909	1.00	11.99	A
ATOM	2246	CA	VAL	A	316	17.719	36.389	16.238	1.00	11.29	A
ATOM	2247	CB	VAL	A	316	16.803	37.131	17.251	1.00	12.97	A
ATOM	2248	CG1	VAL	A	316	16.658	36.292	18.541	1.00	12.95	A
ATOM	2249	CG2	VAL	A	316	17.401	38.493	17.602	1.00	11.75	A
ATOM	2250	C	VAL	A	316	17.232	34.929	16.092	1.00	13.11	A
ATOM	2251	O	VAL	A	316	17.813	33.996	16.667	1.00	12.64	A
ATOM	2252	N	ARG	A	317	16.164	34.723	15.327	1.00	9.04	A
ATOM	2253	CA	ARG	A	317	15.672	33.364	15.115	1.00	12.87	A
ATOM	2254	CB	ARG	A	317	14.348	33.372	14.303	1.00	14.06	A
ATOM	2255	CG	ARG	A	317	13.148	33.951	15.076	1.00	13.07	A
ATOM	2256	CD	ARG	A	317	11.823	33.964	14.243	1.00	14.93	A
ATOM	2257	NE	ARG	A	317	11.520	32.611	13.765	1.00	14.57	A
ATOM	2258	CZ	ARG	A	317	10.894	31.677	14.480	1.00	10.03	A
ATOM	2259	NH1	ARG	A	317	10.470	31.934	15.704	1.00	9.62	A
ATOM	2260	NH2	ARG	A	317	10.730	30.461	13.983	1.00	13.56	A
ATOM	2261	C	ARG	A	317	16.730	32.491	14.434	1.00	12.01	A
ATOM	2262	O	ARG	A	317	16.879	31.320	14.783	1.00	12.09	A
ATOM	2263	N	ASN	A	318	17.462	33.033	13.464	1.00	11.68	A
ATOM	2264	CA	ASN	A	318	18.503	32.246	12.796	1.00	13.18	A
ATOM	2265	CB	ASN	A	318	19.123	33.028	11.629	1.00	11.52	A
ATOM	2266	CG	ASN	A	318	18.145	33.249	10.500	1.00	15.15	A
ATOM	2267	OD1	ASN	A	318	17.140	32.557	10.402	1.00	13.70	A
ATOM	2268	ND2	ASN	A	318	18.438	34.211	9.638	1.00	17.31	A
ATOM	2269	C	ASN	A	318	19.613	31.841	13.771	1.00	12.19	A
ATOM	2270	O	ASN	A	318	20.207	30.753	13.658	1.00	9.01	A
ATOM	2271	N	PHE	A	319	19.904	32.715	14.733	1.00	10.68	A
ATOM	2272	CA	PHE	A	319	20.936	32.376	15.707	1.00	9.90	A
ATOM	2273	CB	PHE	A	319	21.274	33.577	16.584	1.00	7.66	A
ATOM	2274	CG	PHE	A	319	22.105	33.212	17.794	1.00	10.09	A
ATOM	2275	CD1	PHE	A	319	23.351	32.644	17.631	1.00	6.01	A

FIGURE 5 (suite)

```
ATOM   2276  CD2 PHE A 319      21.593  33.356  19.087  1.00 10.54      A
ATOM   2277  CE1 PHE A 319      24.102  32.203  18.738  1.00 12.72      A
ATOM   2278  CE2 PHE A 319      22.333  32.919  20.212  1.00 15.07      A
ATOM   2279  CZ  PHE A 319      23.589  32.338  20.027  1.00 12.59      A
ATOM   2280  C   PHE A 319      20.449  31.222  16.587  1.00 10.27      A
ATOM   2281  O   PHE A 319      21.203  30.282  16.868  1.00 12.47      A
ATOM   2282  N   PHE A 320      19.188  31.275  17.013  1.00 10.21      A
ATOM   2283  CA  PHE A 320      18.649  30.213  17.860  1.00 10.79      A
ATOM   2284  CB  PHE A 320      17.247  30.581  18.363  1.00  9.11      A
ATOM   2285  CG  PHE A 320      17.246  31.285  19.698  1.00  7.96      A
ATOM   2286  CD1 PHE A 320      16.762  30.642  20.833  1.00  9.52      A
ATOM   2287  CD2 PHE A 320      17.723  32.583  19.822  1.00 12.60      A
ATOM   2288  CE1 PHE A 320      16.750  31.282  22.082  1.00  6.69      A
ATOM   2289  CE2 PHE A 320      17.712  33.244  21.075  1.00  9.45      A
ATOM   2290  CZ  PHE A 320      17.220  32.579  22.209  1.00  8.89      A
ATOM   2291  C   PHE A 320      18.598  28.912  17.089  1.00  7.76      A
ATOM   2292  O   PHE A 320      18.856  27.838  17.634  1.00  9.90      A
ATOM   2293  N   THR A 321      18.274  29.013  15.801  1.00  8.04      A
ATOM   2294  CA  THR A 321      18.199  27.829  14.950  1.00  6.79      A
ATOM   2295  CB  THR A 321      17.687  28.224  13.551  1.00  7.01      A
ATOM   2296  OG1 THR A 321      16.334  28.695  13.691  1.00 11.25      A
ATOM   2297  CG2 THR A 321      17.731  27.032  12.573  1.00  9.32      A
ATOM   2298  C   THR A 321      19.535  27.128  14.872  1.00 11.09      A
ATOM   2299  O   THR A 321      19.594  25.896  14.823  1.00 10.46      A
ATOM   2300  N   LYS A 322      20.617  27.904  14.873  1.00  8.41      A
ATOM   2301  CA  LYS A 322      21.950  27.319  14.849  1.00  8.00      A
ATOM   2302  CB  LYS A 322      22.970  28.329  14.299  1.00  6.38      A
ATOM   2303  CG  LYS A 322      24.410  27.805  14.359  1.00 10.15      A
ATOM   2304  CD  LYS A 322      25.396  28.712  13.615  1.00  8.08      A
ATOM   2305  CE  LYS A 322      26.665  27.922  13.317  1.00 11.78      A
ATOM   2306  NZ  LYS A 322      27.577  28.702  12.437  1.00 18.79      A
ATOM   2307  C   LYS A 322      22.415  26.857  16.242  1.00  9.52      A
ATOM   2308  O   LYS A 322      22.864  25.711  16.425  1.00  9.02      A
ATOM   2309  N   HIS A 323      22.289  27.735  17.231  1.00 10.06      A
ATOM   2310  CA  HIS A 323      22.793  27.420  18.569  1.00  9.00      A
ATOM   2311  CB  HIS A 323      22.710  28.677  19.469  1.00  7.78      A
ATOM   2312  CG  HIS A 323      23.655  28.657  20.637  1.00  9.56      A
ATOM   2313  CD2 HIS A 323      23.426  28.762  21.970  1.00  9.53      A
ATOM   2314  ND1 HIS A 323      25.028  28.560  20.494  1.00  7.88      A
ATOM   2315  CE1 HIS A 323      25.602  28.615  21.683  1.00  9.47      A
ATOM   2316  NE2 HIS A 323      24.653  28.736  22.598  1.00 12.97      A
ATOM   2317  C   HIS A 323      22.082  26.230  19.222  1.00  9.52      A
ATOM   2318  O   HIS A 323      22.687  25.507  20.019  1.00  8.65      A
ATOM   2319  N   TYR A 324      20.808  26.034  18.877  1.00  9.61      A
ATOM   2320  CA  TYR A 324      20.024  24.911  19.427  1.00 10.38      A
ATOM   2321  CB  TYR A 324      18.767  25.434  20.149  1.00  6.95      A
ATOM   2322  CG  TYR A 324      19.137  26.376  21.277  1.00  7.33      A
ATOM   2323  CD1 TYR A 324      19.195  27.752  21.072  1.00  5.99      A
ATOM   2324  CE1 TYR A 324      19.656  28.618  22.097  1.00  8.99      A
ATOM   2325  CD2 TYR A 324      19.533  25.882  22.513  1.00  7.61      A
ATOM   2326  CE2 TYR A 324      19.994  26.731  23.525  1.00  5.98      A
ATOM   2327  CZ  TYR A 324      20.052  28.094  23.303  1.00  7.54      A
ATOM   2328  OH  TYR A 324      20.547  28.926  24.294  1.00  7.56      A
ATOM   2329  C   TYR A 324      19.627  23.893  18.338  1.00  7.02      A
ATOM   2330  O   TYR A 324      18.677  23.118  18.498  1.00 10.94      A
ATOM   2331  N   GLY A 325      20.387  23.868  17.254  1.00  7.94      A
ATOM   2332  CA  GLY A 325      20.064  22.938  16.181  1.00  7.51      A
ATOM   2333  C   GLY A 325      20.514  21.493  16.386  1.00 12.01      A
ATOM   2334  O   GLY A 325      21.492  21.227  17.097  1.00 10.59      A
ATOM   2335  N   THR A 326      19.788  20.564  15.752  1.00  8.75      A
ATOM   2336  CA  THR A 326      20.113  19.132  15.790  1.00 10.25      A
ATOM   2337  CB  THR A 326      19.005  18.311  15.135  1.00  9.46      A
ATOM   2338  OG1 THR A 326      17.759  18.707  15.708  1.00 10.73      A
ATOM   2339  CG2 THR A 326      19.212  16.788  15.369  1.00  7.67      A
ATOM   2340  C   THR A 326      21.432  18.937  15.038  1.00  9.78      A
ATOM   2341  O   THR A 326      22.278  18.131  15.452  1.00 10.90      A
ATOM   2342  N   SER A 327      21.614  19.688  13.953  1.00 12.37      A
ATOM   2343  CA  SER A 327      22.858  19.666  13.176  1.00 11.58      A
ATOM   2344  CB  SER A 327      22.743  18.752  11.935  1.00 14.65      A
ATOM   2345  OG  SER A 327      21.725  19.192  11.051  1.00 10.13      A
ATOM   2346  C   SER A 327      23.158  21.118  12.764  1.00 10.87      A
ATOM   2347  O   SER A 327      22.419  22.031  13.149  1.00  9.05      A
ATOM   2348  N   ALA A 328      24.228  21.331  12.000  1.00 11.22      A
ATOM   2349  CA  ALA A 328      24.637  22.690  11.567  1.00 10.30      A
ATOM   2350  CB  ALA A 328      23.682  23.234  10.518  1.00 12.01      A
ATOM   2351  C   ALA A 328      24.602  23.592  12.790  1.00 11.88      A
```

FIGURE 5 (suite)

ATOM	2352	O	ALA	A	328	24.046	24.674	12.742	1.00	13.69	A
ATOM	2353	N	ASN	A	329	25.197	23.140	13.887	1.00	11.26	A
ATOM	2354	CA	ASN	A	329	25.150	23.910	15.123	1.00	10.51	A
ATOM	2355	CB	ASN	A	329	24.422	23.083	16.205	1.00	8.81	A
ATOM	2356	CG	ASN	A	329	25.132	21.771	16.536	1.00	9.32	A
ATOM	2357	OD1	ASN	A	329	26.352	21.717	16.573	1.00	11.49	A
ATOM	2358	ND2	ASN	A	329	24.360	20.714	16.792	1.00	10.75	A
ATOM	2359	C	ASN	A	329	26.526	24.402	15.604	1.00	12.21	A
ATOM	2360	O	ASN	A	329	27.515	24.381	14.849	1.00	9.35	A
ATOM	2361	N	ASP	A	330	26.586	24.863	16.851	1.00	10.38	A
ATOM	2362	CA	ASP	A	330	27.837	25.386	17.412	1.00	9.41	A
ATOM	2363	CB	ASP	A	330	27.575	26.677	18.208	1.00	10.91	A
ATOM	2364	CG	ASP	A	330	27.239	27.852	17.331	1.00	13.71	A
ATOM	2365	OD1	ASP	A	330	26.333	28.653	17.720	1.00	14.93	A
ATOM	2366	OD2	ASP	A	330	27.880	27.981	16.261	1.00	10.16	A
ATOM	2367	C	ASP	A	330	28.536	24.416	18.346	1.00	10.31	A
ATOM	2368	O	ASP	A	330	29.484	24.809	19.029	1.00	8.29	A
ATOM	2369	N	ASN	A	331	28.111	23.153	18.363	1.00	8.79	A
ATOM	2370	CA	ASN	A	331	28.698	22.217	19.311	1.00	10.91	A
ATOM	2371	CB	ASN	A	331	27.942	20.869	19.267	1.00	11.40	A
ATOM	2372	CG	ASN	A	331	26.579	20.924	19.989	1.00	15.36	A
ATOM	2373	OD1	ASN	A	331	25.926	19.893	20.194	1.00	12.09	A
ATOM	2374	ND2	ASN	A	331	26.156	22.115	20.372	1.00	9.71	A
ATOM	2375	C	ASN	A	331	30.220	22.012	19.218	1.00	12.28	A
ATOM	2376	O	ASN	A	331	30.877	21.866	20.255	1.00	12.57	A
ATOM	2377	N	ALA	A	332	30.795	22.001	18.012	1.00	10.00	A
ATOM	2378	CA	ALA	A	332	32.252	21.842	17.903	1.00	12.41	A
ATOM	2379	CB	ALA	A	332	32.677	21.733	16.445	1.00	12.06	A
ATOM	2380	C	ALA	A	332	32.964	23.028	18.548	1.00	8.53	A
ATOM	2381	O	ALA	A	332	33.973	22.872	19.247	1.00	11.75	A
ATOM	2382	N	ALA	A	333	32.447	24.216	18.297	1.00	9.64	A
ATOM	2383	CA	ALA	A	333	33.057	25.422	18.858	1.00	10.83	A
ATOM	2384	CB	ALA	A	333	32.424	26.655	18.223	1.00	9.42	A
ATOM	2385	C	ALA	A	333	32.910	25.473	20.379	1.00	10.44	A
ATOM	2386	O	ALA	A	333	33.787	25.982	21.096	1.00	9.81	A
ATOM	2387	N	ILE	A	334	31.787	24.963	20.869	1.00	9.49	A
ATOM	2388	CA	ILE	A	334	31.536	24.919	22.305	1.00	10.34	A
ATOM	2389	CB	ILE	A	334	30.099	24.404	22.567	1.00	7.35	A
ATOM	2390	CG2	ILE	A	334	29.902	24.030	24.056	1.00	4.48	A
ATOM	2391	CG1	ILE	A	334	29.093	25.467	22.091	1.00	8.68	A
ATOM	2392	CD1	ILE	A	334	27.628	24.953	22.043	1.00	8.29	A
ATOM	2393	C	ILE	A	334	32.593	24.003	22.946	1.00	9.03	A
ATOM	2394	O	ILE	A	334	33.239	24.352	23.954	1.00	6.82	A
ATOM	2395	N	GLN	A	335	32.805	22.847	22.333	1.00	6.99	A
ATOM	2396	CA	GLN	A	335	33.800	21.903	22.831	1.00	8.99	A
ATOM	2397	CB	GLN	A	335	33.695	20.589	22.053	1.00	11.58	A
ATOM	2398	CG	GLN	A	335	32.448	19.784	22.446	1.00	21.44	A
ATOM	2399	CD	GLN	A	335	32.279	18.518	21.598	1.00	30.71	A
ATOM	2400	OE1	GLN	A	335	33.212	18.083	20.927	1.00	34.68	A
ATOM	2401	NE2	GLN	A	335	31.089	17.926	21.638	1.00	37.34	A
ATOM	2402	C	GLN	A	335	35.223	22.438	22.774	1.00	12.27	A
ATOM	2403	O	GLN	A	335	36.014	22.219	23.704	1.00	10.25	A
ATOM	2404	N	ALA	A	336	35.547	23.143	21.690	1.00	10.75	A
ATOM	2405	CA	ALA	A	336	36.868	23.726	21.514	1.00	12.71	A
ATOM	2406	CB	ALA	A	336	36.989	24.375	20.091	1.00	9.35	A
ATOM	2407	C	ALA	A	336	37.109	24.794	22.591	1.00	11.11	A
ATOM	2408	O	ALA	A	336	38.247	25.134	22.894	1.00	11.00	A
ATOM	2409	N	ASN	A	337	36.025	25.310	23.164	1.00	8.06	A
ATOM	2410	CA	ASN	A	337	36.125	26.342	24.185	1.00	9.10	A
ATOM	2411	CB	ASN	A	337	35.098	27.440	23.887	1.00	8.86	A
ATOM	2412	CG	ASN	A	337	35.621	28.457	22.874	1.00	12.21	A
ATOM	2413	OD1	ASN	A	337	36.333	29.417	23.230	1.00	12.38	A
ATOM	2414	ND2	ASN	A	337	35.301	28.237	21.605	1.00	13.95	A
ATOM	2415	C	ASN	A	337	35.979	25.816	25.622	1.00	9.52	A
ATOM	2416	O	ASN	A	337	35.647	26.565	26.534	1.00	7.92	A
ATOM	2417	N	ALA	A	338	36.242	24.523	25.806	1.00	8.29	A
ATOM	2418	CA	ALA	A	338	36.194	23.863	27.117	1.00	8.92	A
ATOM	2419	CB	ALA	A	338	37.188	24.526	28.069	1.00	10.50	A
ATOM	2420	C	ALA	A	338	34.825	23.786	27.785	1.00	8.55	A
ATOM	2421	O	ALA	A	338	34.732	23.671	29.000	1.00	10.41	A
ATOM	2422	N	PHE	A	339	33.765	23.844	27.002	1.00	7.84	A
ATOM	2423	CA	PHE	A	339	32.410	23.781	27.553	1.00	8.93	A
ATOM	2424	CB	PHE	A	339	31.624	25.034	27.120	1.00	7.76	A
ATOM	2425	CG	PHE	A	339	32.258	26.345	27.576	1.00	10.23	A
ATOM	2426	CD1	PHE	A	339	32.566	26.557	28.923	1.00	11.28	A
ATOM	2427	CD2	PHE	A	339	32.497	27.369	26.664	1.00	9.75	A

FIGURE 5 (suite)

```
ATOM   2428  CE1 PHE A 339      33.108  27.795  29.360  1.00 11.58      A
ATOM   2429  CE2 PHE A 339      33.033  28.613  27.077  1.00  8.17      A
ATOM   2430  CZ  PHE A 339      33.339  28.820  28.437  1.00  8.56      A
ATOM   2431  C   PHE A 339      31.647  22.514  27.151  1.00  9.93      A
ATOM   2432  O   PHE A 339      32.084  21.742  26.279  1.00  9.23      A
ATOM   2433  N   VAL A 340      30.508  22.304  27.797  1.00  8.19      A
ATOM   2434  CA  VAL A 340      29.669  21.139  27.531  1.00 10.26      A
ATOM   2435  CB  VAL A 340      29.169  20.468  28.851  1.00 11.72      A
ATOM   2436  CG1 VAL A 340      28.219  19.269  28.538  1.00  8.46      A
ATOM   2437  CG2 VAL A 340      30.346  19.998  29.679  1.00  8.91      A
ATOM   2438  C   VAL A 340      28.439  21.577  26.742  1.00  6.33      A
ATOM   2439  O   VAL A 340      27.675  22.433  27.186  1.00  6.81      A
ATOM   2440  N   PRO A 341      28.255  21.021  25.547  1.00  6.85      A
ATOM   2441  CD  PRO A 341      29.193  20.162  24.797  1.00 10.26      A
ATOM   2442  CA  PRO A 341      27.082  21.373  24.736  1.00  9.67      A
ATOM   2443  CB  PRO A 341      27.275  20.537  23.468  1.00 11.39      A
ATOM   2444  CG  PRO A 341      28.752  20.386  23.363  1.00 14.97      A
ATOM   2445  C   PRO A 341      25.807  20.931  25.497  1.00 10.96      A
ATOM   2446  O   PRO A 341      25.851  20.024  26.342  1.00 10.96      A
ATOM   2447  N   LEU A 342      24.673  21.558  25.211  1.00  8.13      A
ATOM   2448  CA  LEU A 342      23.435  21.157  25.870  1.00 10.08      A
ATOM   2449  CB  LEU A 342      22.326  22.194  25.646  1.00 12.81      A
ATOM   2450  CG  LEU A 342      22.558  23.605  26.207  1.00 16.13      A
ATOM   2451  CD1 LEU A 342      21.280  24.428  26.007  1.00 10.84      A
ATOM   2452  CD2 LEU A 342      22.908  23.542  27.715  1.00 14.00      A
ATOM   2453  C   LEU A 342      22.981  19.821  25.288  1.00 11.91      A
ATOM   2454  O   LEU A 342      23.142  19.565  24.072  1.00 10.04      A
ATOM   2455  N   PRO A 343      22.437  18.937  26.147  1.00 10.12      A
ATOM   2456  CD  PRO A 343      22.407  19.074  27.618  1.00  8.23      A
ATOM   2457  CA  PRO A 343      21.947  17.622  25.721  1.00 11.60      A
ATOM   2458  CB  PRO A 343      21.407  17.006  27.021  1.00 11.29      A
ATOM   2459  CG  PRO A 343      22.287  17.643  28.083  1.00 12.10      A
ATOM   2460  C   PRO A 343      20.850  17.839  24.688  1.00 11.38      A
ATOM   2461  O   PRO A 343      20.229  18.896  24.648  1.00 10.75      A
ATOM   2462  N   SER A 344      20.590  16.836  23.861  1.00  9.55      A
ATOM   2463  CA  SER A 344      19.592  16.995  22.801  1.00  8.34      A
ATOM   2464  CB  SER A 344      19.547  15.741  21.940  1.00 15.39      A
ATOM   2465  OG  SER A 344      19.245  14.625  22.760  1.00 23.25      A
ATOM   2466  C   SER A 344      18.185  17.315  23.281  1.00  8.79      A
ATOM   2467  O   SER A 344      17.474  18.051  22.615  1.00 11.06      A
ATOM   2468  N   ASN A 345      17.751  16.744  24.410  1.00 11.97      A
ATOM   2469  CA  ASN A 345      16.403  17.061  24.874  1.00 13.51      A
ATOM   2470  CB  ASN A 345      15.962  16.128  26.015  1.00 11.25      A
ATOM   2471  CG  ASN A 345      16.896  16.145  27.206  1.00 19.63      A
ATOM   2472  OD1 ASN A 345      18.105  16.399  27.083  1.00 15.65      A
ATOM   2473  ND2 ASN A 345      16.343  15.822  28.379  1.00 15.03      A
ATOM   2474  C   ASN A 345      16.296  18.532  25.277  1.00 12.03      A
ATOM   2475  O   ASN A 345      15.236  19.131  25.167  1.00 11.72      A
ATOM   2476  N   TRP A 346      17.397  19.115  25.739  1.00 10.97      A
ATOM   2477  CA  TRP A 346      17.397  20.533  26.097  1.00  9.55      A
ATOM   2478  CB  TRP A 346      18.663  20.890  26.881  1.00  8.50      A
ATOM   2479  CG  TRP A 346      18.475  20.695  28.372  1.00  9.10      A
ATOM   2480  CD2 TRP A 346      17.927  21.660  29.285  1.00 10.08      A
ATOM   2481  CE2 TRP A 346      17.831  21.036  30.549  1.00 12.11      A
ATOM   2482  CE3 TRP A 346      17.502  22.994  29.149  1.00  9.60      A
ATOM   2483  CD1 TRP A 346      18.694  19.553  29.099  1.00  9.06      A
ATOM   2484  NE1 TRP A 346      18.304  19.752  30.411  1.00  9.93      A
ATOM   2485  CZ2 TRP A 346      17.323  21.705  31.682  1.00  9.30      A
ATOM   2486  CZ3 TRP A 346      17.004  23.662  30.261  1.00 10.14      A
ATOM   2487  CH2 TRP A 346      16.917  23.012  31.522  1.00 12.99      A
ATOM   2488  C   TRP A 346      17.298  21.390  24.824  1.00 10.69      A
ATOM   2489  O   TRP A 346      16.509  22.333  24.769  1.00 13.16      A
ATOM   2490  N   LYS A 347      18.087  21.074  23.804  1.00  9.34      A
ATOM   2491  CA  LYS A 347      17.984  21.852  22.557  1.00  8.27      A
ATOM   2492  CB  LYS A 347      18.902  21.287  21.466  1.00 12.86      A
ATOM   2493  CG  LYS A 347      20.416  21.357  21.748  1.00 11.51      A
ATOM   2494  CD  LYS A 347      21.221  21.071  20.440  1.00 14.73      A
ATOM   2495  CE  LYS A 347      22.733  21.317  20.590  1.00 14.12      A
ATOM   2496  NZ  LYS A 347      23.467  20.312  21.462  1.00 10.37      A
ATOM   2497  C   LYS A 347      16.549  21.789  22.030  1.00 10.83      A
ATOM   2498  O   LYS A 347      15.956  22.814  21.631  1.00  8.78      A
ATOM   2499  N   ALA A 348      15.987  20.583  21.997  1.00  9.70      A
ATOM   2500  CA  ALA A 348      14.627  20.418  21.472  1.00  9.41      A
ATOM   2501  CB  ALA A 348      14.238  18.928  21.448  1.00 12.04      A
ATOM   2502  C   ALA A 348      13.589  21.224  22.251  1.00 10.82      A
ATOM   2503  O   ALA A 348      12.678  21.830  21.657  1.00  9.58      A
```

FIGURE 5 (suite)

ATOM	2504	N	ALA	A	349	13.735	21.261	23.569	1.00	9.39	A
ATOM	2505	CA	ALA	A	349	12.791	22.018	24.392	1.00	8.51	A
ATOM	2506	CB	ALA	A	349	13.045	21.750	25.891	1.00	8.51	A
ATOM	2507	C	ALA	A	349	12.909	23.518	24.095	1.00	10.22	A
ATOM	2508	O	ALA	A	349	11.888	24.224	24.012	1.00	8.91	A
ATOM	2509	N	VAL	A	350	14.140	24.002	23.930	1.00	12.16	A
ATOM	2510	CA	VAL	A	350	14.347	25.423	23.649	1.00	8.94	A
ATOM	2511	CB	VAL	A	350	15.863	25.794	23.629	1.00	8.30	A
ATOM	2512	CG1	VAL	A	350	16.075	27.221	23.071	1.00	8.00	A
ATOM	2513	CG2	VAL	A	350	16.439	25.729	25.075	1.00	8.81	A
ATOM	2514	C	VAL	A	350	13.709	25.763	22.305	1.00	10.89	A
ATOM	2515	O	VAL	A	350	13.046	26.787	22.177	1.00	11.46	A
ATOM	2516	N	ARG	A	351	13.890	24.895	21.313	1.00	10.91	A
ATOM	2517	CA	ARG	A	351	13.289	25.144	20.002	1.00	11.54	A
ATOM	2518	CB	ARG	A	351	13.765	24.106	18.988	1.00	10.07	A
ATOM	2519	CG	ARG	A	351	15.237	24.167	18.647	1.00	10.05	A
ATOM	2520	CD	ARG	A	351	15.527	23.433	17.312	1.00	14.16	A
ATOM	2521	NE	ARG	A	351	14.971	22.067	17.282	1.00	17.52	A
ATOM	2522	CZ	ARG	A	351	15.577	20.991	17.780	1.00	14.15	A
ATOM	2523	NH1	ARG	A	351	14.993	19.802	17.708	1.00	14.19	A
ATOM	2524	NH2	ARG	A	351	16.775	21.097	18.338	1.00	15.54	A
ATOM	2525	C	ARG	A	351	11.750	25.097	20.069	1.00	13.24	A
ATOM	2526	O	ARG	A	351	11.061	25.925	19.477	1.00	10.64	A
ATOM	2527	N	ALA	A	352	11.221	24.112	20.786	1.00	10.94	A
ATOM	2528	CA	ALA	A	352	9.772	23.942	20.890	1.00	13.45	A
ATOM	2529	CB	ALA	A	352	9.447	22.656	21.636	1.00	14.54	A
ATOM	2530	C	ALA	A	352	9.028	25.112	21.527	1.00	14.05	A
ATOM	2531	O	ALA	A	352	7.875	25.385	21.193	1.00	9.92	A
ATOM	2532	N	SER	A	353	9.669	25.802	22.454	1.00	9.51	A
ATOM	2533	CA	SER	A	353	9.024	26.932	23.094	1.00	10.39	A
ATOM	2534	CB	SER	A	353	9.503	27.088	24.548	1.00	11.56	A
ATOM	2535	OG	SER	A	353	8.802	26.220	25.436	1.00	14.83	A
ATOM	2536	C	SER	A	353	9.308	28.245	22.386	1.00	12.07	A
ATOM	2537	O	SER	A	353	8.403	29.033	22.178	1.00	12.33	A
ATOM	2538	N	TYR	A	354	10.568	28.459	22.015	1.00	10.56	A
ATOM	2539	CA	TYR	A	354	10.955	29.733	21.455	1.00	8.65	A
ATOM	2540	CB	TYR	A	354	12.240	30.188	22.159	1.00	11.42	A
ATOM	2541	CG	TYR	A	354	12.077	30.164	23.670	1.00	11.26	A
ATOM	2542	CD1	TYR	A	354	11.168	31.007	24.296	1.00	11.16	A
ATOM	2543	CE1	TYR	A	354	10.962	30.955	25.673	1.00	13.86	A
ATOM	2544	CD2	TYR	A	354	12.795	29.265	24.455	1.00	12.94	A
ATOM	2545	CE2	TYR	A	354	12.608	29.204	25.846	1.00	13.83	A
ATOM	2546	CZ	TYR	A	354	11.692	30.048	26.437	1.00	15.93	A
ATOM	2547	OH	TYR	A	354	11.496	29.985	27.784	1.00	31.84	A
ATOM	2548	C	TYR	A	354	11.069	29.882	19.951	1.00	11.12	A
ATOM	2549	O	TYR	A	354	11.137	31.011	19.456	1.00	11.00	A
ATOM	2550	N	LEU	A	355	11.097	28.778	19.218	1.00	9.87	A
ATOM	2551	CA	LEU	A	355	11.156	28.896	17.757	1.00	11.35	A
ATOM	2552	CB	LEU	A	355	12.292	28.069	17.185	1.00	12.01	A
ATOM	2553	CG	LEU	A	355	13.697	28.633	17.424	1.00	18.77	A
ATOM	2554	CD1	LEU	A	355	14.731	27.617	16.930	1.00	13.44	A
ATOM	2555	CD2	LEU	A	355	13.856	29.963	16.666	1.00	19.42	A
ATOM	2556	C	LEU	A	355	9.848	28.484	17.086	1.00	12.49	A
ATOM	2557	O	LEU	A	355	9.337	29.208	16.231	1.00	13.91	A
ATOM	2558	N	THR	A	356	9.300	27.331	17.458	1.00	13.88	A
ATOM	2559	CA	THR	A	356	8.036	26.866	16.849	1.00	16.44	A
ATOM	2560	CB	THR	A	356	7.414	25.759	17.704	1.00	19.06	A
ATOM	2561	OG1	THR	A	356	8.352	24.678	17.794	1.00	22.02	A
ATOM	2562	CG2	THR	A	356	6.108	25.265	17.077	1.00	20.44	A
ATOM	2563	C	THR	A	356	7.058	28.040	16.684	1.00	15.88	A
ATOM	2564	O	THR	A	356	6.609	28.642	17.658	1.00	14.53	A
ATOM	2565	N	ALA	A	357	6.720	28.362	15.441	1.00	16.53	A
ATOM	2566	CA	ALA	A	357	5.892	29.536	15.175	1.00	15.13	A
ATOM	2567	CB	ALA	A	357	5.654	29.669	13.662	1.00	17.87	A
ATOM	2568	C	ALA	A	357	4.569	29.630	15.918	1.00	18.27	A
ATOM	2569	O	ALA	A	357	4.141	30.714	16.295	1.00	19.17	A
ATOM	2570	N	SER	A	358	3.930	28.492	16.127	1.00	18.84	A
ATOM	2571	CA	SER	A	358	2.643	28.444	16.800	1.00	22.62	A
ATOM	2572	CB	SER	A	358	1.953	27.125	16.459	1.00	18.79	A
ATOM	2573	OG	SER	A	358	2.853	26.049	16.654	1.00	21.93	A
ATOM	2574	C	SER	A	358	2.716	28.607	18.318	1.00	22.54	A
ATOM	2575	O	SER	A	358	1.719	28.918	18.949	1.00	19.82	A
ATOM	2576	N	ASN	A	359	3.886	28.410	18.916	1.00	20.48	A
ATOM	2577	CA	ASN	A	359	3.950	28.550	20.358	1.00	16.65	A
ATOM	2578	CB	ASN	A	359	5.249	27.956	20.909	1.00	12.27	A
ATOM	2579	CG	ASN	A	359	5.180	27.718	22.387	1.00	11.80	A

FIGURE 5 (suite)

```
ATOM   2580  OD1 ASN A 359       4.992  28.652  23.170  1.00 16.11      A
ATOM   2581  ND2 ASN A 359       5.329  26.451  22.793  1.00 14.58      A
ATOM   2582  C   ASN A 359       3.844  30.019  20.745  1.00 16.93      A
ATOM   2583  O   ASN A 359       4.550  30.861  20.194  1.00 15.08      A
ATOM   2584  N   ALA A 360       2.972  30.306  21.712  1.00 15.71      A
ATOM   2585  CA  ALA A 360       2.759  31.664  22.208  1.00 18.67      A
ATOM   2586  CB  ALA A 360       1.688  31.651  23.320  1.00 22.67      A
ATOM   2587  C   ALA A 360       4.041  32.309  22.744  1.00 18.59      A
ATOM   2588  O   ALA A 360       4.138  33.532  22.825  1.00 16.11      A
ATOM   2589  N   LEU A 361       5.010  31.488  23.144  1.00 14.62      A
ATOM   2590  CA  LEU A 361       6.276  32.021  23.653  1.00 11.27      A
ATOM   2591  CB  LEU A 361       6.863  31.060  24.685  1.00 15.51      A
ATOM   2592  CG  LEU A 361       6.087  30.788  25.971  1.00 15.37      A
ATOM   2593  CD1 LEU A 361       6.713  29.586  26.688  1.00 15.50      A
ATOM   2594  CD2 LEU A 361       6.086  32.030  26.849  1.00 14.07      A
ATOM   2595  C   LEU A 361       7.334  32.219  22.545  1.00 12.87      A
ATOM   2596  O   LEU A 361       8.430  32.716  22.818  1.00 12.41      A
ATOM   2597  N   SER A 362       7.036  31.821  21.314  1.00  9.97      A
ATOM   2598  CA  SER A 362       8.044  31.936  20.257  1.00 10.76      A
ATOM   2599  CB  SER A 362       7.627  31.145  19.011  1.00 15.72      A
ATOM   2600  OG  SER A 362       6.470  31.707  18.416  1.00 18.79      A
ATOM   2601  C   SER A 362       8.454  33.338  19.822  1.00 12.29      A
ATOM   2602  O   SER A 362       7.637  34.258  19.742  1.00 12.85      A
ATOM   2603  N   ILE A 363       9.741  33.457  19.512  1.00 10.84      A
ATOM   2604  CA  ILE A 363      10.353  34.698  19.072  1.00 14.99      A
ATOM   2605  CB  ILE A 363      11.850  34.461  18.777  1.00 13.05      A
ATOM   2606  CG2 ILE A 363      12.483  35.713  18.198  1.00 12.46      A
ATOM   2607  CG1 ILE A 363      12.578  34.071  20.064  1.00 15.60      A
ATOM   2608  CD1 ILE A 363      13.960  33.442  19.815  1.00 11.48      A
ATOM   2609  C   ILE A 363       9.639  35.206  17.807  1.00 14.29      A
ATOM   2610  O   ILE A 363       9.509  34.481  16.830  1.00 12.01      A
ATOM   2611  N   GLY A 364       9.176  36.451  17.848  1.00 15.53      A
ATOM   2612  CA  GLY A 364       8.477  37.034  16.717  1.00 14.88      A
ATOM   2613  C   GLY A 364       7.040  36.567  16.514  1.00 19.34      A
ATOM   2614  O   GLY A 364       6.436  36.872  15.487  1.00 19.36      A
ATOM   2615  N   ASP A 365       6.471  35.842  17.474  1.00 15.42      A
ATOM   2616  CA  ASP A 365       5.094  35.360  17.323  1.00 16.08      A
ATOM   2617  CB  ASP A 365       4.625  34.691  18.613  1.00 17.24      A
ATOM   2618  CG  ASP A 365       3.195  34.201  18.516  1.00 22.13      A
ATOM   2619  OD1 ASP A 365       2.992  33.003  18.238  1.00 24.97      A
ATOM   2620  OD2 ASP A 365       2.272  35.025  18.698  1.00 22.46      A
ATOM   2621  C   ASP A 365       4.100  36.490  16.954  1.00 20.12      A
ATOM   2622  O   ASP A 365       3.979  37.482  17.668  1.00 17.92      A
ATOM   2623  N   SER A 366       3.379  36.317  15.848  1.00 21.25      A
ATOM   2624  CA  SER A 366       2.419  37.319  15.360  1.00 19.32      A
ATOM   2625  CB  SER A 366       1.704  36.787  14.108  1.00 21.13      A
ATOM   2626  OG  SER A 366       2.640  36.400  13.125  1.00 29.92      A
ATOM   2627  C   SER A 366       1.359  37.814  16.342  1.00 15.84      A
ATOM   2628  O   SER A 366       1.155  39.010  16.461  1.00 22.39      A
ATOM   2629  N   ALA A 367       0.655  36.920  17.024  1.00 18.40      A
ATOM   2630  CA  ALA A 367      -0.384  37.363  17.965  1.00 22.33      A
ATOM   2631  CB  ALA A 367      -1.220  36.175  18.431  1.00 19.13      A
ATOM   2632  C   ALA A 367       0.182  38.093  19.187  1.00 25.24      A
ATOM   2633  O   ALA A 367      -0.402  39.066  19.682  1.00 26.45      A
ATOM   2634  N   VAL A 368       1.311  37.612  19.692  1.00 24.39      A
ATOM   2635  CA  VAL A 368       1.903  38.229  20.864  1.00 21.43      A
ATOM   2636  CB  VAL A 368       2.729  37.182  21.657  1.00 23.84      A
ATOM   2637  CG1 VAL A 368       3.447  37.838  22.850  1.00 19.42      A
ATOM   2638  CG2 VAL A 368       1.810  36.094  22.148  1.00 25.28      A
ATOM   2639  C   VAL A 368       2.770  39.447  20.558  1.00 19.50      A
ATOM   2640  O   VAL A 368       2.713  40.440  21.277  1.00 22.77      A
ATOM   2641  N   CYS A 369       3.557  39.396  19.491  1.00 17.47      A
ATOM   2642  CA  CYS A 369       4.448  40.505  19.195  1.00 20.32      A
ATOM   2643  C   CYS A 369       3.919  41.648  18.322  1.00 23.64      A
ATOM   2644  O   CYS A 369       4.617  42.639  18.120  1.00 26.98      A
ATOM   2645  CB  CYS A 369       5.746  39.977  18.581  1.00 22.42      A
ATOM   2646  SG  CYS A 369       6.819  38.961  19.671  1.00 19.53      A
ATOM   2647  N   GLY A 370       2.698  41.521  17.812  1.00 25.38      A
ATOM   2648  CA  GLY A 370       2.154  42.575  16.966  1.00 27.80      A
ATOM   2649  C   GLY A 370       2.190  43.938  17.627  1.00 21.46      A
ATOM   2650  O   GLY A 370       1.631  44.112  18.705  1.00 25.76      A
ATOM   2651  N   GLY A 371       2.872  44.885  16.988  1.00 20.44      A
ATOM   2652  CA  GLY A 371       2.970  46.237  17.516  1.00 23.12      A
ATOM   2653  C   GLY A 371       3.913  46.463  18.695  1.00 26.63      A
ATOM   2654  O   GLY A 371       3.946  47.561  19.263  1.00 23.97      A
ATOM   2655  N   LYS A 372       4.689  45.443  19.057  1.00 23.24      A
```

FIGURE 5 (suite)

```
ATOM   2656  CA  LYS A 372       5.612  45.537  20.197  1.00 21.66      A
ATOM   2657  CB  LYS A 372       5.141  44.605  21.296  1.00 19.20      A
ATOM   2658  CG  LYS A 372       3.715  44.856  21.675  1.00 25.31      A
ATOM   2659  CD  LYS A 372       3.278  43.936  22.769  1.00 24.34      A
ATOM   2660  CE  LYS A 372       1.884  44.315  23.208  1.00 29.63      A
ATOM   2661  NZ  LYS A 372       1.426  43.423  24.285  1.00 25.95      A
ATOM   2662  C   LYS A 372       7.037  45.167  19.855  1.00 18.74      A
ATOM   2663  O   LYS A 372       7.337  44.799  18.721  1.00 17.43      A
ATOM   2664  N   GLY A 373       7.917  45.247  20.852  1.00 15.44      A
ATOM   2665  CA  GLY A 373       9.297  44.876  20.616  1.00 12.87      A
ATOM   2666  C   GLY A 373      10.366  45.876  21.015  1.00 17.42      A
ATOM   2667  O   GLY A 373      10.168  47.106  20.965  1.00 13.70      A
ATOM   2668  N   ARG A 374      11.517  45.342  21.419  1.00 14.49      A
ATOM   2669  CA  ARG A 374      12.639  46.187  21.792  1.00 13.29      A
ATOM   2670  CB  ARG A 374      13.786  45.339  22.333  1.00 15.72      A
ATOM   2671  CG  ARG A 374      13.456  44.710  23.692  1.00 18.10      A
ATOM   2672  CD  ARG A 374      14.668  44.080  24.332  1.00 20.11      A
ATOM   2673  NE  ARG A 374      15.729  45.034  24.665  1.00 13.47      A
ATOM   2674  CZ  ARG A 374      16.143  45.296  25.899  1.00 13.50      A
ATOM   2675  NH1 ARG A 374      15.564  44.694  26.928  1.00 11.14      A
ATOM   2676  NH2 ARG A 374      17.206  46.082  26.100  1.00  9.65      A
ATOM   2677  C   ARG A 374      13.097  46.989  20.563  1.00 14.09      A
ATOM   2678  O   ARG A 374      13.008  46.517  19.411  1.00 13.90      A
ATOM   2679  N   PRO A 375      13.575  48.225  20.797  1.00 13.52      A
ATOM   2680  CD  PRO A 375      13.680  48.834  22.133  1.00 12.37      A
ATOM   2681  CA  PRO A 375      14.051  49.137  19.753  1.00 15.51      A
ATOM   2682  CB  PRO A 375      14.304  50.445  20.516  1.00 18.56      A
ATOM   2683  CG  PRO A 375      14.669  49.958  21.903  1.00 16.56      A
ATOM   2684  C   PRO A 375      15.282  48.622  19.017  1.00 16.94      A
ATOM   2685  O   PRO A 375      16.130  47.953  19.605  1.00 16.29      A
ATOM   2686  N   GLU A 376      15.384  48.956  17.733  1.00 14.83      A
ATOM   2687  CA  GLU A 376      16.501  48.480  16.928  1.00 14.54      A
ATOM   2688  CB  GLU A 376      16.191  48.638  15.429  1.00 20.94      A
ATOM   2689  CG  GLU A 376      15.989  50.054  14.930  1.00 25.93      A
ATOM   2690  CD  GLU A 376      15.840  50.093  13.408  1.00 28.12      A
ATOM   2691  OE1 GLU A 376      16.852  50.265  12.693  1.00 27.73      A
ATOM   2692  OE2 GLU A 376      14.706  49.921  12.926  1.00 22.85      A
ATOM   2693  C   GLU A 376      17.818  49.144  17.258  1.00 15.46      A
ATOM   2694  O   GLU A 376      17.779  50.308  17.715  1.00 20.34      A
ATOM   2695  OXT GLU A 376      18.870  48.501  17.040  1.00 17.16      A
ATOM   2696  OH2 WAT S1500      35.620  33.372  34.950  1.00  7.74      S
ATOM   2697  OH2 WAT S1501      26.719  26.585  54.115  1.00 13.35      S
ATOM   2698  OH2 WAT S1502      32.910  38.720  42.612  1.00 11.02      S
ATOM   2699  OH2 WAT S1503      25.842  40.990  19.393  1.00 10.30      S
ATOM   2700  OH2 WAT S1504      47.855  24.508  32.439  1.00 11.64      S
ATOM   2701  OH2 WAT S1505      37.575  38.877  30.460  1.00 13.25      S
ATOM   2702  OH2 WAT S1506      43.970  19.166  36.360  1.00 11.89      S
ATOM   2703  OH2 WAT S1507      51.431  26.280  38.870  1.00 11.08      S
ATOM   2704  OH2 WAT S1508      21.180  34.238  33.496  1.00 10.94      S
ATOM   2705  OH2 WAT S1509      34.016  23.145  55.150  1.00  7.21      S
ATOM   2706  OH2 WAT S1510      34.137  35.767  50.996  1.00 14.32      S
ATOM   2707  OH2 WAT S1511      29.833  31.064  61.815  1.00 12.62      S
ATOM   2708  OH2 WAT S1512      36.421  34.348  51.750  1.00  8.81      S
ATOM   2709  OH2 WAT S1513      24.593  22.841  22.601  1.00 14.49      S
ATOM   2710  OH2 WAT S1514      33.875  20.919  53.336  1.00 15.73      S
ATOM   2711  OH2 WAT S1515      55.590  18.894  44.228  1.00 20.22      S
ATOM   2712  OH2 WAT S1516      25.163  24.507  19.298  1.00  7.32      S
ATOM   2713  OH2 WAT S1517      29.287  27.565  53.584  1.00 10.43      S
ATOM   2714  OH2 WAT S1518      27.630  35.157  54.573  1.00 11.84      S
ATOM   2715  OH2 WAT S1519      34.308  40.814  45.314  1.00  9.91      S
ATOM   2716  OH2 WAT S1520      24.097  26.340  47.444  1.00 12.35      S
ATOM   2717  OH2 WAT S1521      26.289  17.353  26.191  1.00 14.15      S
ATOM   2718  OH2 WAT S1522      31.025  26.248  57.309  1.00  9.97      S
ATOM   2719  OH2 WAT S1523      16.012  33.323  36.822  1.00 10.61      S
ATOM   2720  OH2 WAT S1524      35.079  31.981  26.882  1.00  7.27      S
ATOM   2721  OH2 WAT S1525      48.948  16.302  35.666  1.00 22.32      S
ATOM   2722  OH2 WAT S1526      23.036  32.247  50.228  1.00 12.80      S
ATOM   2723  OH2 WAT S1527      41.445  42.204  48.819  1.00 16.71      S
ATOM   2724  OH2 WAT S1528      30.777  34.835  16.827  1.00 12.96      S
ATOM   2725  OH2 WAT S1529       9.482  33.895  27.983  1.00 10.22      S
ATOM   2726  OH2 WAT S1530      10.107  31.646  29.601  1.00 12.12      S
ATOM   2727  OH2 WAT S1531      37.836  31.446  58.127  1.00 18.63      S
ATOM   2728  OH2 WAT S1532      23.419  29.528  35.937  1.00 10.10      S
ATOM   2729  OH2 WAT S1533      36.234  16.727  51.505  1.00  9.28      S
ATOM   2730  OH2 WAT S1534       5.728  38.503  24.985  1.00 13.33      S
ATOM   2731  OH2 WAT S1535      29.914  14.295  35.432  1.00 16.41      S
```

FIGURE 5 (suite)

ATOM	2732	OH2	WAT	S1536	31.310	38.281	18.695	1.00	9.93	S
ATOM	2733	OH2	WAT	S1537	44.863	16.606	36.022	1.00	15.09	S
ATOM	2734	OH2	WAT	S1538	40.186	22.869	38.700	1.00	9.90	S
ATOM	2735	OH2	WAT	S1539	37.549	20.501	28.090	1.00	13.36	S
ATOM	2736	OH2	WAT	S1540	12.913	31.829	29.436	1.00	9.36	S
ATOM	2737	OH2	WAT	S1541	30.589	15.671	37.530	1.00	12.47	S
ATOM	2738	OH2	WAT	S1542	23.885	35.406	43.402	1.00	18.37	S
ATOM	2739	OH2	WAT	S1543	8.663	34.010	25.289	1.00	13.37	S
ATOM	2740	OH2	WAT	S1544	13.484	46.444	33.757	1.00	12.24	S
ATOM	2741	OH2	WAT	S1545	27.923	19.477	57.944	1.00	11.68	S
ATOM	2742	OH2	WAT	S1546	17.540	33.345	7.715	1.00	19.22	S
ATOM	2743	OH2	WAT	S1547	51.552	13.602	41.885	1.00	25.84	S
ATOM	2744	OH2	WAT	S1548	27.270	26.074	40.675	1.00	10.51	S
ATOM	2745	OH2	WAT	S1549	27.760	43.771	20.816	1.00	13.46	S
ATOM	2746	OH2	WAT	S1550	37.046	17.292	27.914	1.00	14.34	S
ATOM	2747	OH2	WAT	S1551	37.573	33.819	20.741	1.00	23.07	S
ATOM	2748	OH2	WAT	S1552	40.930	14.067	35.565	1.00	17.08	S
ATOM	2749	OH2	WAT	S1553	4.472	29.061	32.567	1.00	18.41	S
ATOM	2750	OH2	WAT	S1554	26.302	32.912	28.375	1.00	10.00	S
ATOM	2751	OH2	WAT	S1555	14.165	45.737	16.934	1.00	13.06	S
ATOM	2752	OH2	WAT	S1556	29.555	43.029	36.030	1.00	7.32	S
ATOM	2753	OH2	WAT	S1557	36.451	34.819	37.298	1.00	11.33	S
ATOM	2754	OH2	WAT	S1558	31.931	17.255	49.603	1.00	39.16	S
ATOM	2755	OH2	WAT	S1559	23.622	26.926	37.001	1.00	11.87	S
ATOM	2756	OH2	WAT	S1560	31.327	13.311	33.059	1.00	12.47	S
ATOM	2757	OH2	WAT	S1561	44.899	41.787	36.741	1.00	23.25	S
ATOM	2758	OH2	WAT	S1562	44.879	35.365	50.334	1.00	9.60	S
ATOM	2759	OH2	WAT	S1563	20.827	50.011	18.100	1.00	15.06	S
ATOM	2760	OH2	WAT	S1564	24.374	31.041	38.304	1.00	12.38	S
ATOM	2761	OH2	WAT	S1565	11.411	42.003	26.114	1.00	14.55	S
ATOM	2762	OH2	WAT	S1566	21.341	35.751	40.722	1.00	12.16	S
ATOM	2763	OH2	WAT	S1567	10.175	31.393	39.888	1.00	37.76	S
ATOM	2764	OH2	WAT	S1568	47.181	26.945	33.704	1.00	12.30	S
ATOM	2765	OH2	WAT	S1569	42.028	43.488	36.919	1.00	25.46	S
ATOM	2766	OH2	WAT	S1570	31.053	24.724	15.706	1.00	12.46	S
ATOM	2767	OH2	WAT	S1571	10.314	39.156	33.480	1.00	10.32	S
ATOM	2768	OH2	WAT	S1572	51.433	20.485	50.130	1.00	15.09	S
ATOM	2769	OH2	WAT	S1573	43.925	30.656	51.790	1.00	17.28	S
ATOM	2770	OH2	WAT	S1574	23.091	53.758	28.375	1.00	12.50	S
ATOM	2771	OH2	WAT	S1575	34.977	41.183	53.019	1.00	15.31	S
ATOM	2772	OH2	WAT	S1576	29.766	26.781	12.309	1.00	18.82	S
ATOM	2773	OH2	WAT	S1577	9.190	36.561	30.593	1.00	11.25	S
ATOM	2774	OH2	WAT	S1578	36.599	15.728	48.666	1.00	21.18	S
ATOM	2775	OH2	WAT	S1579	37.724	34.865	54.143	1.00	11.62	S
ATOM	2776	OH2	WAT	S1580	21.457	35.713	12.303	1.00	13.24	S
ATOM	2777	OH2	WAT	S1581	27.734	31.073	59.797	1.00	14.78	S
ATOM	2778	OH2	WAT	S1582	51.536	35.554	40.163	1.00	14.52	S
ATOM	2779	OH2	WAT	S1583	29.933	42.651	53.057	1.00	14.55	S
ATOM	2780	OH2	WAT	S1584	9.469	23.677	25.125	1.00	12.14	S
ATOM	2781	OH2	WAT	S1585	20.704	29.372	11.334	1.00	17.80	S
ATOM	2782	OH2	WAT	S1586	56.481	22.975	38.435	1.00	29.16	S
ATOM	2783	OH2	WAT	S1587	9.572	40.421	17.037	1.00	14.99	S
ATOM	2784	OH2	WAT	S1588	20.542	42.224	40.862	1.00	13.90	S
ATOM	2785	OH2	WAT	S1589	9.567	37.848	39.841	1.00	15.10	S
ATOM	2786	OH2	WAT	S1590	6.391	48.835	28.636	1.00	19.52	S
ATOM	2787	OH2	WAT	S1591	41.492	20.894	55.469	1.00	16.40	S
ATOM	2788	OH2	WAT	S1592	22.505	28.556	52.952	1.00	24.23	S
ATOM	2789	OH2	WAT	S1593	27.720	46.441	20.204	1.00	15.40	S
ATOM	2790	OH2	WAT	S1594	37.216	41.499	30.864	1.00	19.68	S
ATOM	2791	OH2	WAT	S1595	30.199	27.159	15.034	1.00	11.19	S
ATOM	2792	OH2	WAT	S1596	25.139	30.964	53.858	1.00	21.47	S
ATOM	2793	OH2	WAT	S1597	35.730	20.698	18.767	1.00	15.15	S
ATOM	2794	OH2	WAT	S1598	44.994	20.666	23.797	1.00	17.67	S
ATOM	2795	OH2	WAT	S1599	28.802	58.069	26.514	1.00	17.28	S
ATOM	2796	OH2	WAT	S1600	16.767	47.104	22.319	1.00	11.98	S
ATOM	2797	OH2	WAT	S1601	30.159	33.756	60.797	1.00	9.19	S
ATOM	2798	OH2	WAT	S1602	48.106	27.997	36.005	1.00	14.93	S
ATOM	2799	OH2	WAT	S1603	40.650	24.407	21.552	1.00	17.12	S
ATOM	2800	OH2	WAT	S1604	22.968	17.449	18.008	1.00	17.85	S
ATOM	2801	OH2	WAT	S1605	16.621	15.788	18.605	1.00	25.68	S
ATOM	2802	OH2	WAT	S1606	7.206	32.992	16.005	1.00	14.53	S
ATOM	2803	OH2	WAT	S1607	57.149	24.564	47.629	1.00	18.35	S
ATOM	2804	OH2	WAT	S1608	24.205	26.840	10.350	1.00	23.21	S
ATOM	2805	OH2	WAT	S1609	33.745	22.604	31.364	1.00	14.24	S
ATOM	2806	OH2	WAT	S1610	21.687	28.608	49.750	1.00	41.13	S
ATOM	2807	OH2	WAT	S1611	25.572	18.289	18.085	1.00	18.47	S

FIGURE 5 (suite)

```
ATOM   2808  OH2 WAT S1612      29.378  22.049  15.378  1.00 18.53      S
ATOM   2809  OH2 WAT S1613      47.580  17.180  46.156  1.00 18.00      S
ATOM   2810  OH2 WAT S1614      23.216  43.309  37.644  1.00 13.17      S
ATOM   2811  OH2 WAT S1615      22.669  24.274  48.564  1.00 24.15      S
ATOM   2812  OH2 WAT S1616       0.336  31.433  18.582  1.00 27.87      S
ATOM   2813  OH2 WAT S1617      45.294  33.053  51.773  1.00 13.88      S
ATOM   2814  OH2 WAT S1618      44.363  26.868  22.624  1.00 23.01      S
ATOM   2815  OH2 WAT S1619      24.023  16.291  14.532  1.00 14.28      S
ATOM   2816  OH2 WAT S1620      25.803  16.259  28.626  1.00 18.77      S
ATOM   2817  OH2 WAT S1621      10.423  51.944  32.078  1.00 36.29      S
ATOM   2818  OH2 WAT S1622      26.115  58.809  27.014  1.00 15.64      S
ATOM   2819  OH2 WAT S1623       1.344  28.356  22.672  1.00 26.37      S
ATOM   2820  OH2 WAT S1624      26.639  58.198  21.115  1.00 25.02      S
ATOM   2821  OH2 WAT S1625      26.622  32.997  55.284  1.00 16.24      S
ATOM   2822  OH2 WAT S1626      15.027  52.473  26.183  1.00 21.76      S
ATOM   2823  OH2 WAT S1627      57.187  25.783  44.900  1.00 20.20      S
ATOM   2824  OH2 WAT S1628      44.922  43.322  47.514  1.00 18.96      S
ATOM   2825  OH2 WAT S1629      32.001  38.779  53.199  1.00 17.42      S
ATOM   2826  OH2 WAT S1630      30.741  52.390  22.108  1.00 18.11      S
ATOM   2827  OH2 WAT S1631      14.999  39.258  44.162  1.00 19.15      S
ATOM   2828  OH2 WAT S1632      44.210  20.606  55.552  1.00 17.79      S
ATOM   2829  OH2 WAT S1633      21.471  43.377  12.416  1.00 19.05      S
ATOM   2830  OH2 WAT S1634      13.869  15.823  31.777  1.00 25.21      S
ATOM   2831  OH2 WAT S1635      52.620  30.612  55.173  1.00 30.08      S
ATOM   2832  OH2 WAT S1636      26.556  19.486  52.050  1.00 29.07      S
ATOM   2833  OH2 WAT S1637      21.965  25.980  45.841  1.00 19.07      S
ATOM   2834  OH2 WAT S1638      51.617  33.897  42.473  1.00  9.81      S
ATOM   2835  OH2 WAT S1639      11.552  20.655  19.351  1.00 16.68      S
ATOM   2836  OH2 WAT S1640      30.899  45.201  19.222  1.00 26.19      S
ATOM   2837  OH2 WAT S1641      31.709  48.342  31.000  1.00 18.10      S
ATOM   2838  OH2 WAT S1642      23.676  25.327  22.818  1.00 14.28      S
ATOM   2839  OH2 WAT S1643      25.577  17.219  46.479  1.00 20.91      S
ATOM   2840  OH2 WAT S1644      18.005  18.283  19.152  1.00 24.14      S
ATOM   2841  OH2 WAT S1645      52.881  16.705  50.095  1.00 20.16      S
ATOM   2842  OH2 WAT S1646       5.848  42.562  37.856  1.00 19.01      S
ATOM   2843  OH2 WAT S1647      43.582  14.659  34.565  1.00 28.17      S
ATOM   2844  OH2 WAT S1648      22.374  17.743  20.886  1.00 18.81      S
ATOM   2845  OH2 WAT S1649       8.712  48.989  27.030  1.00 23.87      S
ATOM   2846  OH2 WAT S1650       2.521  47.157  34.228  1.00 30.10      S
ATOM   2847  OH2 WAT S1651      44.220  43.064  40.109  1.00 29.97      S
ATOM   2848  OH2 WAT S1652      27.919  24.353  12.179  1.00 16.62      S
ATOM   2849  OH2 WAT S1653       3.523  42.077  26.249  1.00 22.83      S
ATOM   2850  OH2 WAT S1654      20.380  44.291  37.672  1.00 17.30      S
ATOM   2851  OH2 WAT S1655      57.034  28.423  45.056  1.00 27.44      S
ATOM   2852  OH2 WAT S1656      49.668  24.467  30.455  1.00 22.73      S
ATOM   2853  OH2 WAT S1657      51.259  13.409  45.586  1.00 34.23      S
ATOM   2854  OH2 WAT S1658       9.456  23.136  36.163  1.00 24.71      S
ATOM   2855  OH2 WAT S1659      52.331  23.665  57.905  1.00 18.92      S
ATOM   2856  OH2 WAT S1660      43.381  40.535  56.268  1.00 30.03      S
ATOM   2857  OH2 WAT S1661      13.806  46.776  43.159  1.00 30.72      S
ATOM   2858  OH2 WAT S1662      53.981  30.491  48.223  1.00 13.32      S
ATOM   2859  OH2 WAT S1663      41.765  26.570  28.744  1.00 27.76      S
ATOM   2860  OH2 WAT S1664      40.737  17.318  53.732  1.00 24.67      S
ATOM   2861  OH2 WAT S1665      13.225  44.990   8.674  1.00 28.84      S
ATOM   2862  OH2 WAT S1666      49.013  41.254  39.651  1.00 28.00      S
ATOM   2863  OH2 WAT S1667      44.805  37.426  30.933  1.00 16.56      S
ATOM   2864  OH2 WAT S1668      43.625  18.020  54.500  1.00 24.62      S
ATOM   2865  OH2 WAT S1669      14.317  25.699  46.118  1.00 34.64      S
ATOM   2866  OH2 WAT S1670       3.256  42.913  32.109  1.00 29.06      S
ATOM   2867  OH2 WAT S1671      10.555  49.763  20.725  1.00 28.19      S
ATOM   2868  OH2 WAT S1672      10.096  51.223  27.611  1.00 23.49      S
ATOM   2869  OH2 WAT S1673      14.363  23.946  36.209  1.00 40.49      S
ATOM   2870  OH2 WAT S1674      25.126  59.432  22.831  1.00 22.37      S
ATOM   2871  OH2 WAT S1675      36.093   4.004  46.425  1.00 41.05      S
ATOM   2872  OH2 WAT S1676      58.346  33.177  43.906  1.00 32.25      S
ATOM   2873  OH2 WAT S1677      48.932  35.192  51.801  1.00 26.68      S
ATOM   2874  OH2 WAT S1678      58.902  19.301  43.107  1.00 25.48      S
ATOM   2875  OH2 WAT S1679      44.340  42.085  50.822  1.00 28.00      S
ATOM   2876  OH2 WAT S1680      50.480  38.266  34.016  1.00 31.92      S
ATOM   2877  OH2 WAT S1681      32.259  20.178  55.706  1.00 22.68      S
ATOM   2878  OH2 WAT S1682       5.907  48.823  21.778  1.00 41.37      S
ATOM   2879  OH2 WAT S1683      50.286  29.738  36.205  1.00 41.24      S
ATOM   2880  OH2 WAT S1684      48.359  24.392  27.682  1.00 21.59      S
ATOM   2881  OH2 WAT S1685      28.819  16.491  25.944  1.00 22.91      S
ATOM   2882  OH2 WAT S1686      27.814  39.366  53.598  1.00 22.13      S
ATOM   2883  OH2 WAT S1687      23.282  56.182  29.647  1.00 21.73      S
```

FIGURE 5 (suite)

```
ATOM   2884  OH2 WAT S1688      11.176  51.488  23.245  1.00 39.40      S
ATOM   2885  OH2 WAT S1689      19.333  13.893  25.470  1.00 16.29      S
ATOM   2886  OH2 WAT S1690      15.528  35.966  43.442  1.00 24.55      S
ATOM   2887  OH2 WAT S1691      28.485  18.098  54.189  1.00 38.82      S
ATOM   2888  OH2 WAT S1692      49.461  42.346  42.415  1.00 29.71      S
ATOM   2889  OH2 WAT S1693       6.986  51.318  31.491  1.00 38.19      S
ATOM   2890  OH2 WAT S1694      45.805  30.330  30.352  1.00 31.74      S
ATOM   2891  OH2 WAT S1695      12.688  17.949  24.810  1.00 24.29      S
ATOM   2892  OH2 WAT S1696      10.481  44.192  41.405  1.00 30.36      S
ATOM   2893  OH2 WAT S1697      36.497  25.163  61.042  1.00 22.75      S
ATOM   2894  OH2 WAT S1698      38.997   8.895  40.582  1.00 35.83      S
ATOM   2895  OH2 WAT S1699      34.429  41.271  24.603  1.00 25.66      S
ATOM   2896  OH2 WAT S1700       9.264  39.356  31.031  1.00 12.79      S
ATOM   2897  OH2 WAT S1701      10.070  23.977  42.971  1.00 38.68      S
ATOM   2898  OH2 WAT S1702      18.383  29.372   9.706  1.00 36.59      S
ATOM   2899  OH2 WAT S1703      49.044  14.511  44.663  1.00 29.13      S
ATOM   2900  OH2 WAT S1704      24.559  26.271  39.612  1.00  9.57      S
ATOM   2901  OH2 WAT S1705      20.114  45.757  12.779  1.00 24.18      S
ATOM   2902  OH2 WAT S1706      40.248  22.113  20.074  1.00 29.44      S
ATOM   2903  OH2 WAT S1707      18.194  41.869  42.229  1.00 17.46      S
ATOM   2904  OH2 WAT S1708      37.847  20.546  20.498  1.00 18.73      S
ATOM   2905  OH2 WAT S1709      16.821  29.280  41.001  1.00 24.06      S
ATOM   2906  OH2 WAT S1710      27.294  42.193  52.815  1.00 19.46      S
ATOM   2907  OH2 WAT S1711      40.821  42.347  51.556  1.00 22.66      S
ATOM   2908  OH2 WAT S1712      26.156  40.106  48.095  1.00 24.85      S
ATOM   2909  OH2 WAT S1713      20.103  24.718  47.608  1.00 30.63      S
ATOM   2910  OH2 WAT S1714      24.148  33.741  56.397  1.00 19.34      S
ATOM   2911  OH2 WAT S1715      18.973  45.993  36.285  1.00 18.68      S
ATOM   2912  OH2 WAT S1716      14.529  44.714  35.623  1.00 11.98      S
ATOM   2913  OH2 WAT S1717      38.781  35.753  22.003  1.00 28.14      S
ATOM   2914  OH2 WAT S1718       9.031  37.190  34.220  1.00 30.97      S
ATOM   2915  OH2 WAT S1719      35.994  16.311  25.745  1.00 28.93      S
ATOM   2916  OH2 WAT S1720      13.544  49.140  34.673  1.00 19.62      S
ATOM   2917  OH2 WAT S1721      22.265  37.832  42.637  1.00 21.65      S
ATOM   2918  OH2 WAT S1722       9.246  42.739  13.991  1.00 23.76      S
ATOM   2919  OH2 WAT S1723      46.901  14.013  46.528  1.00 24.08      S
ATOM   2920  OH2 WAT S1724      27.124  17.124  56.373  1.00 20.76      S
ATOM   2921  OH2 WAT S1725       5.808  39.927  37.880  1.00 30.10      S
ATOM   2922  OH2 WAT S1726      42.361  20.811  20.431  1.00 24.61      S
ATOM   2923  OH2 WAT S1727      26.665  17.537  21.374  1.00 22.27      S
ATOM   2924  OH2 WAT S1728      57.473  29.684  48.797  1.00 33.94      S
ATOM   2925  OH2 WAT S1729       0.205  29.580  11.300  1.00 28.38      S
ATOM   2926  OH2 WAT S1730      28.982  12.144  36.663  1.00 22.16      S
ATOM   2927  OH2 WAT S1731      -2.247  31.885  18.386  1.00 37.56      S
ATOM   2928  OH2 WAT S1732      19.593  14.821  28.910  1.00 29.82      S
ATOM   2929  OH2 WAT S1733       1.174  27.052  34.363  1.00 22.10      S
ATOM   2930  OH2 WAT S1734      35.909  11.924  47.248  1.00 27.93      S
ATOM   2931  OH2 WAT S1735      41.887  40.436  52.838  1.00 28.22      S
ATOM   2932  OH2 WAT S1736      26.213  19.454  10.997  1.00 22.64      S
ATOM   2933  OH2 WAT S1737      34.114  42.884  34.175  1.00 28.42      S
ATOM   2934  OH2 WAT S1738      22.945  32.302  53.065  1.00 25.85      S
ATOM   2935  OH2 WAT S1739      39.089  15.172  28.466  1.00 31.20      S
ATOM   2936  OH2 WAT S1740      47.610  43.601  46.621  1.00 36.15      S
ATOM   2937  OH2 WAT S1741      16.327  45.853  37.179  1.00 17.39      S
ATOM   2938  OH2 WAT S1742      55.363  25.260  59.367  1.00 29.21      S
ATOM   2939  OH2 WAT S1743      30.641  36.731  14.630  1.00 26.83      S
ATOM   2940  OH2 WAT S1744      10.864  46.250  10.531  1.00 23.96      S
ATOM   2941  OH2 WAT S1745      33.170  48.399  28.312  1.00 27.45      S
ATOM   2942  OH2 WAT S1746      32.054  14.892  42.067  1.00 24.32      S
ATOM   2943  OH2 WAT S1747      42.724  28.782  21.018  1.00 34.32      S
ATOM   2944  OH2 WAT S1748      51.123  15.697  52.194  1.00 27.97      S
ATOM   2945  OH2 WAT S1749      42.354  43.166  56.140  1.00 29.49      S
ATOM   2946  OH2 WAT S1750      28.037  37.891  13.736  1.00 33.67      S
ATOM   2947  OH2 WAT S1751      51.086  26.646  30.768  1.00 30.84      S
ATOM   2948  OH2 WAT S1752      10.931  38.592  10.467  1.00 25.71      S
ATOM   2949  OH2 WAT S1753      25.655  29.886  60.929  1.00 19.64      S
ATOM   2950  OH2 WAT S1754      17.145  13.376  23.383  1.00 34.23      S
ATOM   2951  OH2 WAT S1755      44.748  12.372  45.391  1.00 18.99      S
ATOM   2952  OH2 WAT S1756      24.658  10.868  33.101  1.00 39.56      S
ATOM   2953  OH2 WAT S1757      10.322  35.265  39.792  1.00 31.55      S
ATOM   2954  OH2 WAT S1758      57.341  22.537  45.377  1.00 16.36      S
ATOM   2955  OH2 WAT S1759       9.420  34.820  36.963  1.00 32.92      S
ATOM   2956  OH2 WAT S1760      32.502  28.596  14.854  1.00 21.37      S
ATOM   2957  OH2 WAT S1761      39.205  22.929  17.441  1.00 35.60      S
ATOM   2958  OH2 WAT S1762      20.840  52.812  17.278  1.00 31.30      S
ATOM   2959  OH2 WAT S1763      34.711  11.735  35.138  1.00 32.11      S
```

FIGURE 5 (suite)

```
ATOM   2960  OH2 WAT S1764      51.666  34.131  47.365  1.00 35.34      S
ATOM   2961  OH2 WAT S1765      -2.014  36.180  15.830  1.00 28.16      S
ATOM   2962  OH2 WAT S1766      15.482  48.721  37.060  1.00 29.26      S
ATOM   2963  OH2 WAT S1767      40.630  14.716  31.062  1.00 40.40      S
ATOM   2964  OH2 WAT S1768      23.698  61.256  21.533  1.00 16.86      S
ATOM   2965  OH2 WAT S1769      24.781  28.532  54.977  1.00 16.20      S
ATOM   2966  OH2 WAT S1770      26.852  25.257  10.061  1.00 30.41      S
ATOM   2967  OH2 WAT S1771      43.726  10.405  46.878  1.00 29.13      S
ATOM   2968  OH2 WAT S1772      25.837  37.362  54.027  1.00 21.97      S
ATOM   2969  OH2 WAT S1773      33.373  46.686  32.566  1.00 26.20      S
ATOM   2970  OH2 WAT S1774      27.264  20.817  13.545  1.00 22.02      S
ATOM   2971  OH2 WAT S1775      47.925  30.806  31.477  1.00 33.49      S
ATOM   2972  OH2 WAT S1776       8.238  38.202  37.592  1.00 26.28      S
ATOM   2973  OH2 WAT S1777      21.090  51.641  25.222  1.00 18.54      S
ATOM   2974  OH2 WAT S1778       6.267  38.069  32.873  1.00 22.17      S
ATOM   2975  OH2 WAT S1779      23.234  49.347  16.745  1.00 24.08      S
ATOM   2976  OH2 WAT S1780      22.134  39.856  40.656  1.00 21.00      S
ATOM   2977  OH2 WAT S1781      20.856  35.405   9.637  1.00 23.13      S
ATOM   2978  OH2 WAT S1782      21.475  53.999  26.047  1.00 27.01      S
ATOM   2979  OH2 WAT S1783      34.915  27.212  15.190  1.00 31.71      S
ATOM   2980  OH2 WAT S1784      45.211  12.993  42.137  1.00 21.38      S
ATOM   2981  OH2 WAT S1785      38.126  34.805  40.034  1.00 17.57      S
ATOM   2982  OH2 WAT S1786      30.962  49.798  21.332  1.00 32.31      S
ATOM   2983  OH2 WAT S1787      33.222  19.319  25.705  1.00 29.22      S
ATOM   2984  OH2 WAT S1788      40.144  19.662  28.253  1.00 33.93      S
ATOM   2985  OH2 WAT S1789       6.555  28.590  37.281  1.00 28.90      S
ATOM   2986  OH2 WAT S1790      43.426  43.935  45.155  1.00 34.35      S
ATOM   2987  OH2 WAT S1791       3.263  33.201  14.705  1.00 33.11      S
ATOM   2988  OH2 WAT S1792      20.149  16.998  31.047  1.00 26.99      S
ATOM   2989  OH2 WAT S1793      34.123  42.842  21.180  1.00 24.49      S
ATOM   2990  OH2 WAT S1794      49.929  18.274  53.829  1.00 39.26      S
ATOM   2991  OH2 WAT S1795      14.815  31.617   9.739  1.00 35.94      S
ATOM   2992  OH2 WAT S1796      45.588  41.539  53.753  1.00 35.01      S
ATOM   2993  OH2 WAT S1797      33.245  52.433  24.002  1.00 34.85      S
ATOM   2994  OH2 WAT S1798      43.010  24.276  22.909  1.00 21.38      S
ATOM   2995  OH2 WAT S1799      19.769  14.826  46.718  1.00 30.67      S
ATOM   2996  OH2 WAT S1800      29.812  17.873  43.458  1.00 28.85      S
ATOM   2997  OH2 WAT S1801       7.028  22.438  24.718  1.00 30.13      S
ATOM   2998  OH2 WAT S1802       7.451  42.723  16.836  1.00 34.86      S
ATOM   2999  OH2 WAT S1803      13.062  50.532  16.899  1.00 27.23      S
ATOM   3000  OH2 WAT S1804      31.535  17.528  46.115  1.00 21.48      S
ATOM   3001  OH2 WAT S1805       1.214  41.199  23.409  1.00 33.03      S
ATOM   3002  OH2 WAT S1806      12.350  33.958  40.836  1.00 34.82      S
ATOM   3003  OH2 WAT S1807      33.164  41.928  54.755  1.00 33.81      S
ATOM   3004  OH2 WAT S1808       4.467  50.285  27.482  1.00 36.79      S
ATOM   3005  OH2 WAT S1809      60.702  26.732  42.684  1.00 35.13      S
ATOM   3006  OH2 WAT S1810      22.799  31.560  57.795  1.00 32.80      S
ATOM   3007  OH2 WAT S1811      16.630  35.862   8.507  1.00 29.92      S
ATOM   3008  OH2 WAT S1812      58.212  35.487  40.540  1.00 33.76      S
ATOM   3009  OH2 WAT S1813      31.566  17.525  26.426  1.00 39.01      S
ATOM   3010  OH2 WAT S1814      38.884  37.614  20.120  1.00 33.89      S
ATOM   3011  OH2 WAT S1815      58.154  24.777  37.822  1.00 35.73      S
ATOM   3012  OH2 WAT S1816      34.384  14.783  47.649  1.00 37.28      S
ATOM   3013  OH2 WAT S1817       3.439  43.153  36.372  1.00 30.78      S
ATOM   3014  OH2 WAT S1818      47.394  12.444  43.290  1.00 30.32      S
ATOM   3015  OH2 WAT S1819      24.644  13.829  44.044  1.00 32.65      S
ATOM   3016  OH2 WAT S1820      35.990  42.985  32.322  1.00 29.66      S
ATOM   3017  OH2 WAT S1821      26.914  40.212   9.947  1.00 33.58      S
ATOM   3018  OH2 WAT S1822      40.296  29.386  23.361  1.00 44.10      S
ATOM   3019  OH2 WAT S1823      42.915  30.163  27.417  1.00 33.23      S
ATOM   3020  OH2 WAT S1824      14.322  38.428   8.032  1.00 35.73      S
ATOM   3021  OH2 WAT S1825      33.329  16.000  45.385  1.00 29.78      S
ATOM   3022  OH2 WAT S1826      55.683  28.168  38.449  1.00 30.81      S
ATOM   3023  OH2 WAT S1827      18.514  45.706   9.695  1.00 34.33      S
ATOM   3024  OH2 WAT S1828      19.453  54.788  22.809  1.00 42.02      S
ATOM   3025  OH2 WAT S1829      46.686  27.005  20.816  1.00 31.17      S
ATOM   3026  OH2 WAT S1830      50.779  32.327  54.666  1.00 44.04      S
ATOM   3027  OH2 WAT S1831       5.243  43.614  40.262  1.00 40.69      S
ATOM   3028  OH2 WAT S1832      45.151  43.041  33.919  1.00 28.47      S
ATOM   3029  OH2 WAT S1833      26.385  11.949  41.104  1.00 33.70      S
ATOM   3030  OH2 WAT S1834      36.104  26.756  17.653  1.00 32.43      S
ATOM   3031  OH2 WAT S1835      40.585   7.298  41.894  1.00 32.97      S
ATOM   3032  OH2 WAT S1836      22.940  54.196  16.985  1.00 39.88      S
ATOM   3033  OH2 WAT S1837      53.968  24.450  37.442  1.00 39.29      S
ATOM   3034  OH2 WAT S1838      16.318  26.973  42.179  1.00 32.94      S
ATOM   3035  OH2 WAT S1839      14.513  48.940  39.307  1.00 29.97      S
```

FIGURE 5 (suite)

```
ATOM   3036  OH2 WAT S1840      31.652   6.945  51.493  1.00 27.66      S
ATOM   3037  OH2 WAT S1841      41.996  11.677  38.039  1.00 37.88      S
ATOM   3038  OH2 WAT S1842       7.510  48.642  19.668  1.00 35.11      S
ATOM   3039  OH2 WAT S1843      42.467   3.493  49.912  1.00 33.41      S
ATOM   3040  OH2 WAT S1844      59.776  22.501  42.412  1.00 44.37      S
ATOM   3041  OH2 WAT S1845       7.867  44.473  12.687  1.00 34.20      S
ATOM   3042  OH2 WAT S1846      15.405  45.353  39.658  1.00 38.08      S
ATOM   3043  OH2 WAT S1847      13.585  15.183  28.501  1.00 36.58      S
ATOM   3044  OH2 WAT S1848      48.442  41.492  47.985  1.00 26.95      S
ATOM   3045  OH2 WAT S1849      50.374  40.886  46.017  1.00 34.93      S
ATOM   3046  OH2 WAT S1850      44.568   8.030  45.822  1.00 42.34      S
ATOM   3047  OH2 WAT S1851      48.705  28.443  22.632  1.00 34.87      S
ATOM   3048  OH2 WAT S1852      38.217  33.408  18.268  1.00 40.91      S
ATOM   3049  OH2 WAT S1853      26.698  47.866  16.749  1.00 26.87      S
ATOM   3050  OH2 WAT S1854      36.624  40.405  57.361  1.00 30.57      S
ATOM   3051  OH2 WAT S1855      44.243  22.209  21.682  1.00 25.97      S
ATOM   3052  OH2 WAT S1856      50.807  22.291  30.826  1.00 30.01      S
ATOM   3053  OH2 WAT S1857       2.113  19.175  16.420  1.00 39.64      S
ATOM   3054  OH2 WAT S1858      35.799  20.261  25.717  1.00 29.95      S
ATOM   3055  OH2 WAT S1859      10.845  51.013  18.474  1.00 29.30      S
ATOM   3056  OH2 WAT S1860      13.036  16.982  18.603  1.00 35.56      S
ATOM   3057  OH2 WAT S1861      48.755  33.466  53.529  1.00 32.19      S
ATOM   3058  OH2 WAT S1862      28.542  12.640  28.777  1.00 32.37      S
ATOM   3059  OH2 WAT S1863      15.582  33.781  40.294  1.00 31.38      S
ATOM   3060  OH2 WAT S1864      15.389  51.736  31.264  1.00 35.97      S
ATOM   3061  OH2 WAT S1865      59.586  24.576  44.154  1.00 38.45      S
ATOM   3062  OH2 WAT S1866      33.931  18.197  52.470  1.00 31.45      S
ATOM   3063  OH2 WAT S1867      33.400  24.810  14.487  1.00 31.43      S
ATOM   3064  OH2 WAT S1868       2.939  39.474  28.464  1.00 42.13      S
ATOM   3065  OH2 WAT S1869      52.149  36.661  45.439  1.00 34.90      S
ATOM   3066  OH2 WAT S1870      45.901  34.119  54.146  1.00 28.55      S
ATOM   3067  OH2 WAT S1871      21.485  29.372  44.666  1.00 37.03      S
ATOM   3068  OH2 WAT S1872      10.455  19.175  23.705  1.00 36.18      S
ATOM   3069  OH2 WAT S1873      29.820  54.141  17.625  1.00 37.56      S
ATOM   3070  OH2 WAT S1874      36.824  12.036  41.616  1.00 36.62      S
ATOM   3071  OH2 WAT S1875      35.575  29.695  13.582  1.00 31.58      S
ATOM   3072  OH2 WAT S1876      47.689  26.645  56.483  1.00 29.75      S
ATOM   3073  OH2 WAT S1877      25.923  24.021   7.877  1.00 35.32      S
ATOM   3074  OH2 WAT S1878      35.914  42.663  19.444  1.00 38.13      S
ATOM   3075  OH2 WAT S1879      53.553  27.199  37.462  1.00 34.02      S
ATOM   3076  OH2 WAT S1880      31.012  18.989  51.960  1.00 32.14      S
ATOM   3077  OH2 WAT S1881       5.543  24.207  39.126  1.00 33.92      S
ATOM   3078  OH2 WAT S1882      12.515  49.450  14.280  1.00 38.32      S
ATOM   3079  OH2 WAT S1883      19.621  34.441  42.264  1.00 32.10      S
ATOM   3080  OH2 WAT S1884       0.567  34.443  15.606  1.00 41.76      S
ATOM   3081  OH2 WAT S1885      19.842  21.597  48.228  1.00 38.20      S
ATOM   3082  OH2 WAT S1886      17.245  44.489  41.443  1.00 36.34      S
ATOM   3083  OH2 WAT S1887      31.241  17.703  18.315  1.00 43.85      S
ATOM   3084  OH2 WAT S1888      47.120  35.974  31.511  1.00 44.95      S
ATOM   3085  OH2 WAT S1889      16.721  12.447  25.646  1.00 42.81      S
ATOM   3086  OH2 WAT S1890      17.002  21.309  47.530  1.00 35.74      S
ATOM   3087  OH2 WAT S1891      11.124  36.224  11.415  1.00 28.23      S
ATOM   3088  OH2 WAT S1892      31.476  35.439  12.666  1.00 29.98      S
ATOM   3089  OH2 WAT S1893      20.313  44.798   8.239  1.00 38.49      S
ATOM   3090  OH2 WAT S1894      49.492  37.692  31.490  1.00 34.21      S
ATOM   3091  OH2 WAT S1895      11.168  48.631  11.775  1.00 35.00      S
ATOM   3092  OH2 WAT S1896       8.149  35.174  12.830  1.00 43.18      S
ATOM   3093  OH2 WAT S1897      42.985  36.028  29.277  1.00 37.84      S
ATOM   3094  OH2 WAT S1898      15.722  26.088  38.269  1.00 40.56      S
ATOM   3095  OH2 WAT S1899       9.466  42.584  43.325  1.00 38.58      S
ATOM   3096  OH2 WAT S1900      55.683  27.859  55.011  1.00 40.16      S
ATOM   3097  OH2 WAT S1901      16.412  44.824   6.088  1.00 35.00      S
ATOM   3098  OH2 WAT S1902      30.819  20.863  13.376  1.00 36.12      S
ATOM   3099  OH2 WAT S1903      20.083  45.050  40.249  1.00 46.55      S
ATOM   3100  OH2 WAT S1904      55.216  16.767  37.256  1.00 32.34      S
ATOM   3101  OH2 WAT S1905      17.194  15.633  31.289  1.00 41.92      S
ATOM   3102  OH2 WAT S1906      55.468  39.305  45.956  1.00 33.48      S
ATOM   3103  OH2 WAT S1907      34.073  59.171  22.880  1.00 29.68      S
ATOM   3104  OH2 WAT S1908      11.696  23.487  37.533  1.00 44.83      S
ATOM   3105  OH2 WAT S1909      37.193  57.700  24.645  1.00 29.20      S
ATOM   3106  OH2 WAT S1910       4.958  20.071  12.971  1.00 38.75      S
ATOM   3107  OH2 WAT S1911      28.212  15.651  46.090  1.00 44.28      S
ATOM   3108  OH2 WAT S1912      25.791  17.881  50.101  1.00 44.07      S
ATOM   3109  OH2 WAT S1913      44.830  16.225  28.015  1.00 37.34      S
ATOM   3110  OH2 WAT S1914      45.538  25.603  58.524  1.00 31.60      S
ATOM   3111  OH2 WAT S1915      31.849  53.832  20.135  1.00 44.08      S
```

FIGURE 5 (suite)

```
ATOM   3112  OH2 WAT S1916      55.981  32.376  47.108  1.00 41.65      S
ATOM   3113  OH2 WAT S1917      35.699  24.353  16.736  1.00 43.04      S
ATOM   3114  OH2 WAT S1918       3.252  25.157  38.490  1.00 42.38      S
ATOM   3115  OH2 WAT S1919      34.711  10.496  39.861  1.00 36.97      S
ATOM   3116  OS4 PLA P1001       8.781  29.613  10.689  1.00 35.34      P
ATOM   3117  S2  PLA P1001       9.783  28.546  11.256  1.00 33.57      P
ATOM   3118  OS5 PLA P1001      10.409  27.663   9.867  1.00 40.37      P
ATOM   3119  OS6 PLA P1001      11.159  29.189  12.135  1.00 41.03      P
ATOM   3120  C15 PLA P1001       9.058  27.351  12.199  1.00 30.49      P
ATOM   3121  C14 PLA P1001       7.662  27.126  12.015  1.00 23.35      P
ATOM   3122  C16 PLA P1001       9.978  26.532  12.898  1.00 28.94      P
ATOM   3123  C10 PLA P1001       9.499  25.436  13.634  1.00 30.90      P
ATOM   3124  C11 PLA P1001       8.025  25.127  13.485  1.00 25.22      P
ATOM   3125  C13 PLA P1001       7.134  25.968  12.614  1.00 21.41      P
ATOM   3126  O3  PLA P1001       5.837  25.588  12.437  1.00 24.00      P
ATOM   3127  C12 PLA P1001       7.519  23.932  14.212  1.00 27.53      P
ATOM   3128  O2  PLA P1001       6.235  23.585  13.967  1.00 21.97      P
ATOM   3129  C9  PLA P1001      10.366  24.618  14.415  1.00 32.13      P
ATOM   3130  C8  PLA P1001       9.876  23.541  15.205  1.00 31.56      P
ATOM   3131  S1  PLA P1001      10.846  22.324  15.981  1.00 31.16      P
ATOM   3132  OS3 PLA P1001      12.358  22.881  16.679  1.00 39.44      P
ATOM   3133  OS2 PLA P1001      11.138  21.153  14.733  1.00 28.72      P
ATOM   3134  OS1 PLA P1001      10.061  21.436  17.011  1.00 39.17      P
ATOM   3135  C7  PLA P1001       8.424  23.154  15.086  1.00 20.93      P
ATOM   3136  N2  PLA P1001       7.947  21.974  15.652  1.00 27.49      P
ATOM   3137  N1  PLA P1001       6.731  21.270  15.708  1.00 26.74      P
ATOM   3138  C2  PLA P1001       6.780  19.948  16.206  1.00 29.90      P
ATOM   3139  C1  PLA P1001       7.938  19.230  16.659  1.00 26.11      P
ATOM   3140  C3  PLA P1001       5.455  19.218  16.215  1.00 29.97      P
ATOM   3141  O1  PLA P1001       4.329  19.881  15.839  1.00 27.77      P
ATOM   3142  C4  PLA P1001       5.419  17.867  16.622  1.00 27.79      P
ATOM   3143  C5  PLA P1001       6.617  17.226  17.060  1.00 24.04      P
ATOM   3144  C6  PLA P1001       7.890  17.875  17.105  1.00 28.93      P
ATOM   3145  CL1 PLA P1001       8.958  17.179  17.619  1.00 13.83      P
ATOM   3146  OS4 PLA P1002      -1.265  32.010  14.293  1.00 40.73      P
ATOM   3147  S2  PLA P1002      -2.593  31.401  14.907  1.00 34.43      P
ATOM   3148  OS5 PLA P1002      -3.293  32.318  16.225  1.00 36.70      P
ATOM   3149  OS6 PLA P1002      -3.702  31.417  13.545  1.00 38.28      P
ATOM   3150  C15 PLA P1002      -2.360  29.762  15.366  1.00 37.51      P
ATOM   3151  C14 PLA P1002      -1.339  29.023  14.693  1.00 32.35      P
ATOM   3152  C16 PLA P1002      -3.324  29.136  16.198  1.00 32.13      P
ATOM   3153  C10 PLA P1002      -3.227  27.770  16.534  1.00 32.57      P
ATOM   3154  C11 PLA P1002      -2.159  26.968  15.824  1.00 27.55      P
ATOM   3155  C13 PLA P1002      -1.219  27.623  14.849  1.00 32.76      P
ATOM   3156  O3  PLA P1002      -0.300  26.897  14.135  1.00 26.73      P
ATOM   3157  C12 PLA P1002      -2.103  25.533  16.170  1.00 29.76      P
ATOM   3158  O2  PLA P1002      -1.093  24.861  15.620  1.00 19.01      P
ATOM   3159  C9  PLA P1002      -4.076  27.177  17.503  1.00 28.28      P
ATOM   3160  C8  PLA P1002      -4.072  25.777  17.756  1.00 30.57      P
ATOM   3161  S1  PLA P1002      -4.937  25.049  19.065  1.00 30.09      P
ATOM   3162  OS3 PLA P1002      -6.417  25.925  19.382  1.00 26.32      P
ATOM   3163  OS2 PLA P1002      -3.886  25.328  20.444  1.00 39.20      P
ATOM   3164  OS1 PLA P1002      -5.060  23.483  18.960  1.00 35.43      P
ATOM   3165  C7  PLA P1002      -3.056  24.884  17.116  1.00 30.01      P
ATOM   3166  N2  PLA P1002      -2.942  23.547  17.510  1.00 30.83      P
ATOM   3167  N1  PLA P1002      -1.994  22.600  17.132  1.00 26.11      P
ATOM   3168  C2  PLA P1002      -2.109  21.347  17.777  1.00 33.57      P
ATOM   3169  C1  PLA P1002      -3.069  20.979  18.767  1.00 28.55      P
ATOM   3170  C3  PLA P1002      -1.126  20.289  17.352  1.00 32.70      P
ATOM   3171  O1  PLA P1002      -0.254  20.633  16.366  1.00 26.71      P
ATOM   3172  C4  PLA P1002      -1.181  19.011  17.978  1.00 35.63      P
ATOM   3173  C5  PLA P1002      -2.175  18.727  18.965  1.00 32.99      P
ATOM   3174  C6  PLA P1002      -3.137  19.696  19.364  1.00 34.82      P
ATOM   3175  CL1 PLA P1002      -4.110  19.418  20.286  1.00 26.50      P
ATOM   3176  P   PO4 I1000      31.378  36.578  34.442  1.00  7.30      I
ATOM   3177  O1  PO4 I1000      30.121  37.237  34.900  1.00  8.97      I
ATOM   3178  O2  PO4 I1000      32.276  37.583  33.795  1.00  6.24      I
ATOM   3179  O3  PO4 I1000      31.043  35.497  33.462  1.00  6.45      I
ATOM   3180  O4  PO4 I1000      32.089  35.965  35.624  1.00  7.79      I
ATOM   3181  U   U   I1100       0.273  22.910  15.547  1.00 30.28      I
ATOM   3182  U   U   I1101       4.450  22.112  14.520  1.00 29.14      I
ATOM   3183  U   U   I1102       2.292  24.635  12.979  0.50 39.41      I
ATOM   3184  NA  NA  I1200      37.019  13.768  54.963  1.00 21.53      I
END
```

FIGURE 5 (suite)

LISTE DE SEQUENCES

<110> CENTRE NATIONAL DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE HENRI POINCARE DE NANCY

<120> NOUVELLE PROTEINE DE LIAISON AU PHOSPHATE, COMPOSITIONS PHARMACEUTIQUES LA CONTENANT ET SES UTILISATIONS

<130> WOB 03 BU CNR HPBP

<150> FR 03/12729
<151> 2004-10-30

<160> 11

<170> PatentIn version 3.1

<210> 1
<211> 376
<212> PRT
<213> Homo sapiens

<220>
<221> MISC_FEATURE
<222> (1)..(1)
<223> D ou S

<220>
<221> MISC_FEATURE
<222> (3)..(3)
<223> N ou D

<220>
<221> MISC_FEATURE
<222> (11)..(11)
<223> Q ou E

<220>
<221> MISC_FEATURE
<222> (30)..(30)
<223> V ou T

<220>
<221> MISC_FEATURE
<222> (43)..(43)
<223> K ou S

<220>
<221> MISC_FEATURE
<222> (50)..(50)
<223> D ou N

<220>
<221> MISC_FEATURE
<222> (54)..(54)
<223> N ou D

<220>
<221> MISC_FEATURE

<222> (67)..(67)
<223> T ou S

<220>
<221> MISC_FEATURE
<222> (68)..(68)
<223> E ou Q

<220>
<221> MISC_FEATURE
<222> (75)..(75)
<223> D ou N

<220>
<221> MISC_FEATURE
<222> (77)..(77)
<223> E ou Q

<220>
<221> MISC_FEATURE
<222> (85)..(85)
<223> Q ou E

<220>
<221> MISC_FEATURE
<222> (102)..(102)
<223> A ou G

<220>
<221> MISC_FEATURE
<222> (122)..(122)
<223> D ou N

<220>
<221> MISC_FEATURE
<222> (143)..(143)
<223> S ou V

<220>
<221> MISC_FEATURE
<222> (219)..(219)
<223> T ou S

<220>
<221> MISC_FEATURE
<222> (224)..(224)
<223> D ou N

<220>
<221> MISC_FEATURE
<222> (252)..(252)
<223> V ou S

<220>
<221> MISC_FEATURE
<222> (266)..(266)
<223> D ou N

<400> 1
Xaa Ile Xaa Gly Gly Gly Ala Thr Leu Pro Xaa Lys Leu Tyr Leu Thr
1 5 10 15

```
Pro Asp Val Leu Thr Ala Gly Phe Ala Pro Tyr Ile Gly Xaa Gly Ser
            20                  25                  30

Gly Lys Gly Lys Ile Ala Phe Leu Glu Asn Xaa Tyr Asn Gln Phe Gly
        35                  40                  45

Thr Xaa Thr Thr Lys Xaa Val His Trp Ala Gly Ser Asp Ser Lys Leu
    50                  55                  60

Thr Ala Xaa Xaa Leu Ala Thr Tyr Ala Ala Xaa Lys Xaa Pro Gly Trp
65                  70                  75                  80

Gly Lys Leu Ile Xaa Val Pro Ser Val Ala Thr Ser Val Ala Ile Pro
                85                  90                  95

Phe Arg Lys Ala Gly Xaa Asn Ala Val Asp Leu Ser Val Lys Glu Leu
            100                 105                 110

Cys Gly Val Phe Ser Gly Arg Ile Ala Xaa Trp Ser Gly Ile Thr Gly
        115                 120                 125

Ala Gly Arg Ser Gly Pro Ile Gln Val Val Tyr Arg Ala Glu Xaa Ser
    130                 135                 140

Gly Thr Thr Glu Leu Phe Thr Arg Phe Leu Asn Ala Lys Cys Thr Thr
145                 150                 155                 160

Gln Pro Gly Thr Phe Ala Val Thr Thr Val Phe Ala Asn Ser Tyr Ser
                165                 170                 175

Leu Gly Leu Ser Pro Leu Ala Gly Ala Val Ala Ala Ile Gly Ser Val
            180                 185                 190

Gly Val Met Ala Ala Asp Asn Asp Val Thr Thr Ala Gln Gly Arg Ile
        195                 200                 205

Thr Tyr Ile Ser Pro Asp Phe Ala Ala Pro Xaa Leu Ala Gly Leu Xaa
    210                 215                 220

Asp Ala Thr Lys Val Ala Arg Thr Gly Lys Gly Ser Ser Ser Gly Gly
225                 230                 235                 240

Gly Ala Glu Gly Lys Ser Pro Ala Ala Ala Asn Xaa Ser Ala Ala Ile
                245                 250                 255

Ser Val Val Pro Leu Pro Ala Ala Ala Xaa Arg Gly Asp Pro Asn Val
            260                 265                 270

Trp Thr Pro Val Phe Gly Ala Val Thr Gly Gly Gly Val Val Ala Tyr
        275                 280                 285

Pro Asp Ser Gly Tyr Pro Ile Leu Gly Phe Thr Asp Leu Ile Phe Ser
    290                 295                 300

Glu Cys Tyr Ala Asn Ala Thr Gln Thr Gly Gln Val Arg Asn Phe Phe
305                 310                 315                 320

Thr Lys His Tyr Gly Thr Ser Ala Asn Asp Asn Ala Ala Ile Gln Ala
                325                 330                 335
```

```
Asn Ala Phe Val Pro Leu Pro Ser Asn Trp Lys Ala Ala Val Arg Ala
            340                 345                 350

Ser Tyr Leu Thr Ala Ser Asn Ala Leu Ser Ile Gly Asp Ser Ala Val
        355                 360                 365

Cys Gly Gly Lys Gly Arg Pro Glu
    370                 375


<210>  2
<211>  376
<212>  PRT
<213>  Homo sapiens

<400>  2
Asp Ile Asn Gly Gly Gly Ala Thr Leu Pro Gln Lys Leu Tyr Leu Thr
1               5                   10                  15

Pro Asp Val Leu Thr Ala Gly Phe Ala Pro Tyr Ile Gly Val Gly Ser
            20                  25                  30

Gly Lys Gly Lys Ile Ala Phe Leu Glu Asn Lys Tyr Asn Gln Phe Gly
        35                  40                  45

Thr Asp Thr Thr Lys Asn Val His Trp Ala Gly Ser Asp Ser Lys Leu
    50                  55                  60

Thr Ala Thr Glu Leu Ala Thr Tyr Ala Ala Asp Lys Glu Pro Gly Trp
65                  70                  75                  80

Gly Lys Leu Ile Gln Val Pro Ser Val Ala Thr Ser Val Ala Ile Pro
                85                  90                  95

Phe Arg Lys Ala Gly Ala Asn Ala Val Asp Leu Ser Val Lys Glu Leu
            100                 105                 110

Cys Gly Val Phe Ser Gly Arg Ile Ala Asp Trp Ser Gly Ile Thr Gly
        115                 120                 125

Ala Gly Arg Ser Gly Pro Ile Gln Val Val Tyr Arg Ala Glu Ser Ser
    130                 135                 140

Gly Thr Thr Glu Leu Phe Thr Arg Phe Leu Asn Ala Lys Cys Thr Thr
145                 150                 155                 160

Gln Pro Gly Thr Phe Ala Val Thr Thr Val Phe Ala Asn Ser Tyr Ser
                165                 170                 175

Leu Gly Leu Ser Pro Leu Ala Gly Ala Val Ala Ala Ile Gly Ser Val
            180                 185                 190

Gly Val Met Ala Ala Asp Asn Asp Val Thr Thr Ala Gln Gly Arg Ile
        195                 200                 205

Thr Tyr Ile Ser Pro Asp Phe Ala Ala Pro Thr Leu Ala Gly Leu Asp
    210                 215                 220

Asp Ala Thr Lys Val Ala Arg Thr Gly Lys Gly Ser Ser Ser Gly Gly
225                 230                 235                 240
```

```
Gly Ala Glu Gly Lys Ser Pro Ala Ala Ala Asn Val Ser Ala Ala Ile
                245                 250                 255

Ser Val Val Pro Leu Pro Ala Ala Ala Asp Arg Gly Asp Pro Asn Val
            260                 265                 270

Trp Thr Pro Val Phe Gly Ala Val Thr Gly Gly Gly Val Val Ala Tyr
        275                 280                 285

Pro Asp Ser Gly Tyr Pro Ile Leu Gly Phe Thr Asp Leu Ile Phe Ser
    290                 295                 300

Glu Cys Tyr Ala Asn Ala Thr Gln Thr Gly Gln Val Arg Asn Phe Phe
305                 310                 315                 320

Thr Lys His Tyr Gly Thr Ser Ala Asn Asp Asn Ala Ala Ile Gln Ala
                325                 330                 335

Asn Ala Phe Val Pro Leu Pro Ser Asn Trp Lys Ala Ala Val Arg Ala
            340                 345                 350

Ser Tyr Leu Thr Ala Ser Asn Ala Leu Ser Ile Gly Asp Ser Ala Val
        355                 360                 365

Cys Gly Gly Lys Gly Arg Pro Glu
    370                 375


<210>  3
<211>  376
<212>  PRT
<213>  Homo sapiens

<400>  3
Ser Ile Asp Gly Gly Gly Ala Thr Leu Pro Glu Lys Leu Tyr Leu Thr
1               5                   10                  15

Pro Asp Val Leu Thr Ala Gly Phe Ala Pro Tyr Ile Gly Thr Gly Ser
            20                  25                  30

Gly Lys Gly Lys Ile Ala Phe Leu Glu Asn Ser Tyr Asn Gln Phe Gly
        35                  40                  45

Thr Asn Thr Thr Lys Asp Val His Trp Ala Gly Ser Asp Ser Lys Leu
    50                  55                  60

Thr Ala Ser Gln Leu Ala Thr Tyr Ala Ala Asn Lys Gln Pro Gly Trp
65                  70                  75                  80

Gly Lys Leu Ile Glu Val Pro Ser Val Ala Thr Ser Val Ala Ile Pro
                85                  90                  95

Phe Arg Lys Ala Gly Gly Asn Ala Val Asp Leu Ser Val Lys Glu Leu
            100                 105                 110

Cys Gly Val Phe Ser Gly Arg Ile Ala Asn Trp Ser Gly Ile Thr Gly
        115                 120                 125

Ala Gly Arg Ser Gly Pro Ile Gln Val Val Tyr Arg Ala Glu Val Ser
    130                 135                 140
```

```
Gly Thr Thr Glu Leu Phe Thr Arg Phe Leu Asn Ala Lys Cys Thr Thr
145                 150                 155                 160

Gln Pro Gly Thr Phe Ala Val Thr Thr Val Phe Ala Asn Ser Tyr Ser
                165                 170                 175

Leu Gly Leu Ser Pro Leu Ala Gly Ala Val Ala Ala Ile Gly Ser Val
            180                 185                 190

Gly Val Met Ala Ala Asp Asn Asp Val Thr Thr Ala Gln Gly Arg Ile
        195                 200                 205

Thr Tyr Ile Ser Pro Asp Phe Ala Ala Pro Ser Leu Ala Gly Leu Asn
    210                 215                 220

Asp Ala Thr Lys Val Ala Arg Thr Gly Lys Gly Ser Ser Ser Gly Gly
225                 230                 235                 240

Gly Ala Glu Gly Lys Ser Pro Ala Ala Ala Asn Ser Ser Ala Ala Ile
                245                 250                 255

Ser Val Val Pro Leu Pro Ala Ala Ala Asn Arg Gly Asp Pro Asn Val
            260                 265                 270

Trp Thr Pro Val Phe Gly Ala Val Thr Gly Gly Gly Val Val Ala Tyr
        275                 280                 285

Pro Asp Ser Gly Tyr Pro Ile Leu Gly Phe Thr Asp Leu Ile Phe Ser
    290                 295                 300

Glu Cys Tyr Ala Asn Ala Thr Gln Thr Gly Gln Val Arg Asn Phe Phe
305                 310                 315                 320

Thr Lys His Tyr Gly Thr Ser Ala Asn Asp Asn Ala Ala Ile Gln Ala
                325                 330                 335

Asn Ala Phe Val Pro Leu Pro Ser Asn Trp Lys Ala Ala Val Arg Ala
            340                 345                 350

Ser Tyr Leu Thr Ala Ser Asn Ala Leu Ser Ile Gly Asp Ser Ala Val
        355                 360                 365

Cys Gly Gly Lys Gly Arg Pro Glu
    370                 375


<210>  4
<211>  355
<212>  PRT
<213>  Homo sapiens

<400>  4
Met Ala Lys Leu Ile Ala Leu Thr Leu Leu Gly Met Gly Leu Ala Leu
1               5                   10                  15

Phe Arg Asn His Gln Ser Ser Tyr Gln Thr Arg Leu Asn Ala Leu Arg
            20                  25                  30

Glu Val Gln Pro Val Glu Leu Pro Asn Cys Asn Leu Val Lys Gly Ile
        35                  40                  45
```

```
Glu Thr Gly Ser Glu Asp Met Glu Ile Leu Pro Asn Gly Leu Ala Phe
    50                  55                  60

Ile Ser Ser Gly Leu Lys Tyr Pro Gly Ile Lys Ser Phe Asn Pro Asn
65                  70                  75                  80

Ser Pro Gly Lys Ile Leu Leu Met Asp Leu Asn Glu Glu Asp Pro Thr
                85                  90                  95

Val Leu Glu Leu Gly Ile Thr Gly Ser Lys Phe Asp Val Ser Ser Phe
            100                 105                 110

Asn Pro His Gly Ile Ser Thr Phe Thr Asp Glu Asp Asn Ala Met Tyr
        115                 120                 125

Leu Leu Val Val Asn His Pro Asp Ala Lys Ser Thr Val Glu Leu Phe
    130                 135                 140

Lys Phe Gln Glu Glu Glu Lys Ser Leu Leu His Leu Lys Thr Ile Arg
145                 150                 155                 160

His Lys Leu Leu Pro Asn Leu Asn Asp Ile Val Ala Val Gly Pro Glu
                165                 170                 175

His Phe Tyr Gly Thr Asn Asp His Tyr Phe Leu Asp Pro Tyr Leu Gln
            180                 185                 190

Ser Trp Glu Met Tyr Leu Gly Leu Ala Trp Ser Tyr Val Val Tyr Tyr
        195                 200                 205

Ser Pro Ser Glu Val Arg Val Val Ala Glu Gly Phe Asp Phe Ala Asn
    210                 215                 220

Gly Ile Asn Ile Ser Pro Asp Gly Lys Tyr Val Tyr Ile Ala Glu Leu
225                 230                 235                 240

Leu Ala His Lys Ile His Val Tyr Glu Lys His Ala Asn Trp Thr Leu
                245                 250                 255

Thr Pro Leu Lys Ser Leu Asp Phe Asn Thr Leu Val Asp Asn Ile Ser
            260                 265                 270

Val Asp Pro Glu Thr Gly Asp Leu Trp Val Gly Cys His Pro Asn Gly
        275                 280                 285

Met Lys Ile Phe Phe Tyr Asp Ser Glu Asn Pro Pro Ala Ser Glu Val
    290                 295                 300

Leu Arg Ile Gln Asn Ile Leu Thr Glu Glu Pro Lys Val Thr Gln Val
305                 310                 315                 320

Tyr Ala Glu Asn Gly Thr Val Leu Gln Gly Ser Thr Val Ala Ser Val
                325                 330                 335

Tyr Lys Gly Lys Leu Leu Ile Gly Thr Val Phe His Lys Ala Leu Tyr
            340                 345                 350

Cys Glu Leu
        355
```

<210> 5
<211> 354
<212> PRT
<213> Homo sapiens

<400> 5

```
Met Gly Ala Trp Val Gly Cys Gly Leu Ala Gly Asp Arg Ala Gly Phe
1               5                  10                  15

Leu Gly Glu Arg Leu Leu Ala Leu Arg Asn Arg Leu Lys Ala Ser Arg
            20                  25                  30

Glu Val Glu Ser Val Asp Leu Pro His Cys His Leu Ile Lys Gly Ile
        35                  40                  45

Glu Ala Gly Ser Glu Asp Ile Asp Ile Leu Pro Asn Gly Leu Ala Phe
    50                  55                  60

Phe Ser Val Gly Leu Lys Phe Pro Gly Leu His Ser Phe Ala Pro Asp
65                  70                  75                  80

Lys Pro Gly Gly Ile Leu Met Met Asp Leu Lys Glu Glu Lys Pro Arg
                85                  90                  95

Ala Arg Glu Leu Arg Ile Ser Arg Gly Phe Asp Leu Ala Ser Phe Asn
            100                 105                 110

Pro His Gly Ile Ser Thr Phe Ile Asp Asn Asp Asp Thr Val Tyr Leu
        115                 120                 125

Phe Val Val Asn His Pro Glu Phe Lys Asn Thr Val Glu Ile Phe Lys
    130                 135                 140

Phe Glu Glu Ala Glu Asn Ser Leu Leu His Leu Lys Thr Val Lys His
145                 150                 155                 160

Glu Leu Leu Pro Ser Val Asn Asp Ile Thr Ala Val Gly Pro Ala His
                165                 170                 175

Phe Tyr Ala Thr Asn Asp His Tyr Phe Ser Asp Pro Phe Leu Lys Tyr
            180                 185                 190

Leu Glu Thr Tyr Leu Asn Leu His Trp Ala Asn Val Val Tyr Tyr Ser
        195                 200                 205

Pro Asn Glu Val Lys Val Val Ala Glu Gly Phe Asp Ser Ala Asn Gly
    210                 215                 220

Ile Asn Ile Ser Pro Asp Asp Lys Tyr Ile Tyr Val Ala Asp Ile Leu
225                 230                 235                 240

Ala His Glu Ile His Val Leu Glu Lys His Thr Asn Met Asn Leu Thr
                245                 250                 255

Gln Leu Lys Val Leu Glu Leu Asp Thr Leu Val Asp Asn Leu Ser Ile
            260                 265                 270

Asp Pro Ser Ser Gly Asp Ile Trp Val Gly Cys His Pro Asn Gly Gln
        275                 280                 285
```

```
Lys Leu Phe Val Tyr Asp Pro Asn Asn Pro Pro Ser Ser Glu Val Leu
    290                 295                 300

Arg Ile Gln Asn Ile Leu Cys Glu Lys Pro Thr Val Thr Thr Val Tyr
305                 310                 315                 320

Ala Asn Asn Gly Ser Val Leu Gln Gly Ser Ser Val Ala Ser Val Tyr
                325                 330                 335

Asp Gly Lys Leu Leu Ile Gly Thr Leu Tyr His Arg Ala Leu Tyr Cys
            340                 345                 350

Glu Leu
```

<210> 6
<211> 354
<212> PRT
<213> Homo sapiens

<400> 6

```
Met Gly Lys Leu Val Ala Leu Val Leu Leu Gly Val Gly Leu Ser Leu
1               5                   10                  15

Val Gly Glu Met Phe Leu Ala Phe Arg Glu Arg Val Asn Ala Ser Arg
            20                  25                  30

Glu Val Glu Pro Val Glu Pro Glu Asn Cys His Leu Ile Glu Glu Leu
        35                  40                  45

Glu Ser Gly Ser Glu Asp Ile Asp Ile Leu Pro Ser Gly Leu Ala Phe
    50                  55                  60

Ile Ser Ser Gly Leu Lys Tyr Pro Gly Met Pro Asn Phe Ala Pro Asp
65                  70                  75                  80

Glu Pro Gly Lys Ile Phe Leu Met Asp Leu Asn Glu Gln Asn Pro Arg
                85                  90                  95

Ala Gln Ala Leu Glu Ile Ser Gly Gly Phe Asp Lys Glu Leu Phe Asn
            100                 105                 110

Pro His Gly Ile Ser Ile Phe Ile Asp Lys Asp Asn Thr Val Tyr Leu
        115                 120                 125

Tyr Val Val Asn His Pro His Met Lys Ser Thr Val Glu Ile Phe Lys
    130                 135                 140

Phe Glu Glu Gln Gln Arg Ser Leu Val Tyr Leu Lys Thr Ile Lys His
145                 150                 155                 160

Glu Leu Leu Lys Ser Val Asn Asp Ile Val Val Leu Gly Pro Glu Gln
                165                 170                 175

Phe Tyr Ala Thr Arg Asp His Tyr Phe Thr Asn Ser Leu Leu Ser Phe
            180                 185                 190

Phe Glu Met Ile Leu Asp Leu Arg Trp Thr Tyr Val Leu Phe Tyr Ser
        195                 200                 205
```

```
Pro Arg Glu Val Lys Val Val Ala Lys Gly Phe Cys Ser Ala Asn Gly
    210                 215                 220

Ile Thr Val Ser Ala Asp Gln Lys Tyr Val Tyr Val Ala Asp Val Ala
225                 230                 235                 240

Ala Lys Asn Ile His Ile Met Glu Lys His Asp Asn Trp Asp Leu Thr
                245                 250                 255

Gln Leu Lys Val Ile Gln Leu Gly Thr Leu Val Asp Asn Leu Thr Val
            260                 265                 270

Asp Pro Ala Thr Gly Asp Ile Leu Ala Gly Cys His Pro Asn Pro Met
        275                 280                 285

Lys Leu Leu Asn Tyr Asn Pro Glu Asp Pro Pro Gly Ser Glu Val Leu
    290                 295                 300

Arg Ile Gln Asn Val Leu Ser Glu Lys Pro Arg Val Ser Thr Val Tyr
305                 310                 315                 320

Ala Asn Asn Gly Ser Val Leu Gln Gly Thr Ser Val Ala Ser Val Tyr
                325                 330                 335

His Gly Lys Ile Leu Ile Gly Thr Val Phe His Lys Thr Leu Tyr Cys

            340                 345                 350

Glu Leu
```

<210> 7
<211> 359
<212> PRT
<213> Oryctolagus cuniculus

<400> 7

```
Met Ala Lys Leu Thr Ala Leu Thr Leu Leu Gly Leu Gly Leu Ala Leu
1               5                   10                  15

Phe Asp Gly Gln Lys Ser Ser Phe Gln Thr Arg Phe Asn Val His Arg
            20                  25                  30

Glu Val Thr Pro Val Glu Leu Pro Asn Cys Asn Leu Val Lys Gly Ile
        35                  40                  45

Asp Asn Gly Ser Glu Asp Leu Glu Ile Leu Pro Asn Gly Leu Ala Phe
    50                  55                  60

Ile Ser Ala Gly Leu Lys Tyr Pro Gly Ile Met Ser Phe Asp Pro Asp
65                  70                  75                  80

Lys Pro Gly Lys Ile Leu Leu Met Asp Leu Asn Glu Lys Asp Pro Val
                85                  90                  95

Val Leu Glu Leu Ser Ile Thr Gly Ser Thr Phe Asp Leu Ser Ser Phe
            100                 105                 110

Asn Pro His Gly Ile Ser Thr Phe Thr Asp Glu Asp Asn Ile Val Tyr
        115                 120                 125
```

```
Leu Met Val Val Asn His Pro Asp Ser Lys Ser Thr Val Glu Leu Phe
    130                 135                 140

Lys Phe Gln Glu Lys Glu Lys Ser Leu Leu His Leu Lys Thr Ile Arg
145                 150                 155                 160

His Lys Leu Leu Pro Ser Val Asn Asp Ile Val Ala Val Gly Pro Glu
                165                 170                 175

His Phe Tyr Ala Thr Asn Asp His Tyr Phe Ile Asp Pro Tyr Leu Lys
            180                 185                 190

Ser Trp Glu Met His Leu Gly Leu Ala Trp Ser Phe Val Thr Tyr Tyr
        195                 200                 205

Ser Pro Asn Asp Val Arg Val Val Ala Glu Gly Phe Asp Phe Ala Asn
    210                 215                 220

Gly Ile Asn Ile Ser Pro Asp Gly Lys Tyr Val Tyr Ile Ala Glu Leu
225                 230                 235                 240

Leu Ala His Lys Ile His Val Tyr Glu Lys His Ala Asn Trp Thr Leu
                245                 250                 255

Thr Pro Leu Lys Ser Leu Asp Phe Asn Thr Leu Val Asp Asn Ile Ser
            260                 265                 270

Val Asp Pro Val Thr Gly Asp Leu Trp Val Gly Cys His Pro Asn Gly
        275                 280                 285

Met Arg Ile Phe Tyr Tyr Asp Pro Lys Asn Pro Pro Ala Ser Glu Val
    290                 295                 300

Leu Arg Ile Gln Asp Ile Leu Ser Lys Glu Pro Lys Val Thr Val Ala
305                 310                 315                 320

Tyr Ala Glu Asn Gly Thr Val Leu Gln Gly Ser Thr Val Ala Ala Val
                325                 330                 335

Tyr Lys Gly Lys Met Leu Val Gly Thr Val Phe His Lys Ala Leu Tyr
            340                 345                 350

Cys Glu Leu Ser Gln Ala Asn
        355
```

<210> 8
<211> 355
<212> PRT
<213> Rattus rattus

<400> 8

```
Met Ala Lys Leu Leu Gly Leu Thr Leu Val Gly Leu Val Leu Ala Leu
1               5                   10                  15

Tyr Lys Asn His Arg Ser Ser Tyr Gln Thr Arg Leu Asn Ala Phe Arg
            20                  25                  30

Glu Val Thr Pro Val Asp Leu Pro Asn Cys Thr Leu Val Lys Gly Ile
        35                  40                  45
```

```
Glu Ala Gly Ala Glu Asp Leu Glu Ile Leu Pro Asn Gly Leu Thr Phe
    50                  55                  60

Phe Ser Thr Phe Leu Lys Tyr Pro Gly Ile Lys Ser Phe Asp Pro Ser
65                  70                  75                  80

Lys Pro Gly Lys Ile Leu Leu Met Asp Leu Asn Glu Lys Glu Pro Ala
                85                  90                  95

Val Ser Glu Leu Ala Ile Met Gly Asn Thr Leu Asp Met Ser Ser Phe
            100                 105                 110

Asn Pro His Gly Ile Ser Thr Phe Ile Asp Glu Asp Asn Thr Val Tyr
        115                 120                 125

Leu Leu Val Val Ser His Pro Asp Ser Ser Ser Thr Val Glu Val Phe
    130                 135                 140

Lys Phe Gln Glu Glu Glu Arg Ser Leu Leu His Leu Lys Thr Ile Thr
145                 150                 155                 160

His Glu Leu Leu Pro Ser Ile Asn Asp Ile Ala Ala Val Gly Pro Glu
                165                 170                 175

Ser Phe Tyr Ala Thr Asn Asp His Tyr Phe Ala Asp Pro Tyr Leu Arg
            180                 185                 190

Ser Trp Glu Met Tyr Leu Gly Leu Ser Trp Ser Asn Val Val Tyr Tyr
        195                 200                 205

Ser Pro Asp Lys Val Arg Val Val Ala Asp Gly Phe Asp Phe Ala Asn
    210                 215                 220

Gly Ile Gly Ile Ser Leu Asp Gly Lys Tyr Val Tyr Ile Ala Glu Leu
225                 230                 235                 240

Leu Ala His Lys Ile His Val Tyr Glu Lys His Ala Asn Trp Thr Leu
                245                 250                 255

Thr Pro Leu Lys Val Leu Ser Phe Asp Thr Leu Val Asp Asn Ile Ser
            260                 265                 270

Val Asp Pro Val Thr Gly Asp Leu Trp Val Gly Cys His Pro Asn Gly
        275                 280                 285

Met Arg Ile Phe Phe Tyr Asp Ser Glu Asn Pro Pro Gly Ser Glu Val
    290                 295                 300

Leu Arg Ile Gln Ser Ile Leu Ser Glu Asp Pro Lys Val Thr Val Val
305                 310                 315                 320

Tyr Ala Glu Asn Gly Thr Val Leu Gln Gly Thr Thr Val Ala Ala Val
                325                 330                 335

Tyr Lys Gly Lys Leu Leu Ile Gly Thr Val Phe His Arg Ala Leu Cys
            340                 345                 350

Cys Tyr Leu
        355
```

<210> 9
<211> 355
<212> PRT
<213> Mus musculus

<400> 9

```
Met Ala Lys Leu Leu Ala Leu Thr Leu Val Gly Leu Val Leu Ala Leu
1               5                  10                  15

Tyr Lys Asn His Arg Ser Ser Tyr Gln Thr Arg Leu Asn Ala Phe Arg
            20                  25                  30

Glu Val Thr Pro Val Glu Leu Pro Asn Cys Asn Leu Val Lys Gly Ile
        35                  40                  45

Glu Thr Gly Ala Glu Asp Leu Glu Ile Leu Pro Asn Gly Leu Thr Phe
    50                  55                  60

Phe Ser Thr Gly Leu Lys Tyr Pro Gly Ile Lys Ser Phe Asp Pro Ser
65                  70                  75                  80

Lys Pro Gly Lys Ile Leu Leu Met Asp Leu Asn Lys Lys Glu Pro Ala
                85                  90                  95

Val Ser Glu Leu Glu Ile Ile Gly Asn Thr Leu Asp Ile Ser Ser Phe
            100                 105                 110

Asn Pro His Gly Ile Ser Thr Phe Thr Asp Glu Asp Asn Thr Val Tyr
        115                 120                 125

Leu Leu Val Val Asn His Pro Asp Ser Ser Ser Thr Val Glu Val Phe
    130                 135                 140

Lys Phe Gln Glu Glu Glu Arg Ser Leu Leu His Leu Lys Thr Ile Thr
145                 150                 155                 160

His Glu Leu Leu Pro Ser Ile Asn Asp Ile Ala Ala Ile Gly Pro Glu
                165                 170                 175

Ser Phe Tyr Ala Thr Asn Asp His Tyr Phe Ala Asp Pro Tyr Leu Arg
            180                 185                 190

Ser Trp Glu Met Tyr Leu Gly Leu Ser Trp Ser Asn Val Val Tyr Tyr
        195                 200                 205

Ser Pro Asp Lys Val Gln Val Val Ala Glu Gly Phe Asp Phe Ala Asn
    210                 215                 220

Gly Ile Gly Ile Ser Leu Asp Gly Lys Tyr Val Tyr Ile Ala Glu Leu
225                 230                 235                 240

Leu Ala His Lys Ile His Val Tyr Glu Lys His Ala Asn Trp Thr Leu
                245                 250                 255

Thr Pro Leu Lys Val Leu Asn Phe Asp Thr Leu Val Asp Asn Ile Ser
            260                 265                 270

Val Asp Pro Val Thr Gly Asp Leu Trp Val Gly Cys His Pro Asn Gly
        275                 280                 285
```

```
Met Arg Ile Phe Phe Tyr Asp Ala Glu Asn Pro Pro Gly Ser Glu Val
    290                 295                 300

Leu Arg Ile Gln Asn Ile Leu Ser Glu Asp Pro Lys Ile Thr Val Val
305                 310                 315                 320

Tyr Ala Glu Asn Gly Thr Val Leu Gln Gly Thr Thr Val Ala Ser Val
                325                 330                 335

Tyr Lys Gly Lys Leu Leu Ile Gly Thr Val Phe His Lys Ala Leu Tyr
            340                 345                 350

Cys Asp Leu
        355
```

<210> 10
<211> 354
<212> PRT
<213> Mus musculus

<400> 10

```
Met Gly Arg Met Val Ala Leu Gly Phe Ala Gly His Arg Val Ala Leu
1               5                   10                  15

Leu Gly Glu Arg Phe Leu Ala Leu Ser Ser Arg Leu Lys Gly Ser Arg
            20                  25                  30

Glu Val Glu Ser Val Asp Leu Pro Asn Cys His Leu Ile Lys Gly Ile
        35                  40                  45

Glu Thr Gly Ala Glu Asp Ile Asp Ile Leu Pro Asn Gly Leu Ala Phe
    50                  55                  60

Phe Ser Val Gly Leu Lys Phe Pro Gly Leu His Ser Phe Ala Pro Asp
65                  70                  75                  80

Lys Pro Gly Gly Ile Leu Met Met Asp Leu Asp Glu Arg Pro Pro Ser
                85                  90                  95

Leu Glu Glu Leu Arg Val Ser Trp Gly Phe Asp Leu Ala Ser Phe Asn
            100                 105                 110

Pro His Gly Ile Ser Thr Phe Ile Asp Asp Asp Asp Thr Val Tyr Leu
        115                 120                 125

Phe Val Val Asn His Pro Gln Phe Ser Asn Thr Val Glu Ile Phe Lys
    130                 135                 140

Phe Gln Glu Ala Glu Asn Ser Leu Leu His Leu Lys Thr Ile Lys His
145                 150                 155                 160

Glu Leu Leu Pro Ser Val Asn Asp Ile Ile Ala Val Gly Pro Ala His
                165                 170                 175

Phe Tyr Ala Thr Asn Asp His Tyr Phe Ser Asp Pro Phe Leu Lys Tyr
            180                 185                 190

Leu Glu Thr Tyr Leu Asn Leu His Trp Ala Asn Val Val Tyr Tyr Ser
        195                 200                 205
```

```
Pro Glu Glu Val Lys Leu Val Ala Glu Gly Phe Asp Ser Ala Asn Gly
    210                 215                 220

Ile Asn Ile Ser Pro Asp Lys Lys Tyr Val Tyr Val Ala Asp Ile Leu
225                 230                 235                 240

Ala His Glu Ile His Val Leu Glu Lys Gln Pro Asn Met Asn Leu Thr
                245                 250                 255

Gln Leu Lys Val Leu Gln Leu Gly Thr Leu Val Asp Asn Leu Ser Ile
            260                 265                 270

Asp Pro Ser Ser Gly Asp Ile Trp Val Gly Cys His Pro Asn Gly Gln
        275                 280                 285

Arg Leu Phe Val Tyr His Pro Asn His Pro Pro Thr Ser Glu Val Leu
    290                 295                 300

Arg Ile Gln Asn Ile Leu Ser Glu Lys Pro Ser Val Thr Thr Val Tyr
305                 310                 315                 320

Ile Asn Asn Gly Ser Val Leu Gln Gly Ser Ser Val Ala Thr Ile Tyr
                325                 330                 335

Asp Arg Lys Leu Leu Val Gly Thr Leu Tyr Gln Lys Ala Leu Tyr Cys
            340                 345                 350

Glu Leu
```

<210> 11
<211> 354
<212> PRT
<213> Mus musculus

<400> 11

```
Met Gly Lys Leu Val Ala Leu Thr Leu Leu Gly Ala Cys Leu Ala Leu
1               5                   10                  15

Ile Gly Glu Arg Leu Leu Asn Phe Arg Glu Arg Val Ser Thr Thr Arg
            20                  25                  30

Glu Ile Lys Ala Thr Glu Pro Gln Asn Cys His Leu Ile Glu Gly Leu
        35                  40                  45

Glu Asn Gly Ser Glu Asp Ile Asp Ile Leu Pro Ser Gly Leu Ala Phe
    50                  55                  60

Ile Ser Thr Gly Leu Lys Tyr Pro Gly Met Pro Ala Phe Ala Pro Asp
65                  70                  75                  80

Lys Pro Gly Arg Ile Phe Leu Met Asp Leu Asn Glu Gln Asn Pro Glu
                85                  90                  95

Ala Gln Ala Leu Glu Ile Ser Gly Gly Leu Asp Gln Glu Ser Leu Asn
            100                 105                 110

Pro His Gly Ile Ser Thr Phe Ile Asp Lys Asp Asn Thr Ala Tyr Leu
        115                 120                 125
```

```
Tyr Val Val Asn His Pro Asn Met Asp Ser Thr Val Glu Ile Phe Lys
    130                 135                 140

Phe Glu Glu Gln Gln Arg Ser Leu Ile His Leu Lys Thr Leu Lys His
145                 150                 155                 160

Glu Leu Leu Lys Ser Val Asn Asp Ile Val Val Leu Gly Pro Glu Gln
                165                 170                 175

Phe Tyr Ala Thr Arg Asp His Tyr Phe Thr Ser Tyr Phe Leu Val Leu
            180                 185                 190

Leu Glu Met Ile Leu Asp Pro His Trp Thr Ser Val Val Phe Tyr Ser
        195                 200                 205

Pro Lys Glu Val Lys Val Val Ala Gln Gly Phe Ser Ser Ala Asn Gly
    210                 215                 220

Ile Thr Val Ser Leu Asp Gln Lys Phe Val Tyr Val Ala Asp Val Thr
225                 230                 235                 240

Ala Lys Asn Ile His Ile Met Lys Lys His Asp Asn Trp Asp Leu Thr
                245                 250                 255

Pro Val Lys Val Ile Gln Leu Gly Thr Leu Val Asp Asn Leu Thr Val
            260                 265                 270

Asp Pro Ala Thr Gly Asp Ile Leu Ala Gly Cys His Pro Asn Pro Met
        275                 280                 285

Lys Leu Leu Ile Tyr Asn Pro Glu Asp Pro Pro Gly Ser Glu Val Leu
    290                 295                 300

Arg Ile Gln Asp Ser Leu Ser Asp Lys Pro Arg Val Ser Thr Leu Tyr
305                 310                 315                 320

Ala Asn Asn Gly Ser Val Leu Gln Gly Ser Thr Val Ala Ser Val Tyr
                325                 330                 335

His Lys Arg Met Leu Ile Gly Thr Ile Phe His Lys Ala Leu Tyr Cys
            340                 345                 350

Asp Leu
```

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

ational Application No
/FR2004/002797

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER
IPC 7 C07K14/47

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)
IPC 7 C07K

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practical, search terms used)
EPO-Internal, Sequence Search, BIOSIS, EMBASE, PAJ, WPI Data

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category °	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	US 2003/158115 A1 (LIESKE JOHN C ET AL) 21 August 2003 (2003-08-21) abstract example 6 SEQ ID No 16	1-9
X	DATABASE UNIPROT 'Online! EBI; 10 October 2003 (2003-10-10), XP002275669 Database accession no. P35482 the whole document	1-9

-/--

[X] Further documents are listed in the continuation of box C.

[X] Patent family members are listed in annex.

° Special categories of cited documents :

"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance

"E" earlier document but published on or after the international filing date

"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)

"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means

"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention

"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone

"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art.

"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search	Date of mailing of the international search report
23 March 2005	01/04/2005

Name and mailing address of the ISA	Authorized officer
European Patent Office, P.B. 5818 Patentlaan 2 NL - 2280 HV Rijswijk Tel. (+31-70) 340-2040, Tx. 31 651 epo nl, Fax: (+31-70) 340-3016	Keller, Y

3

Form PCT/ISA/210 (second sheet) (January 2004)

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International Application No
.../FR2004/002797

C.(Continuation) DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category °	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	KAWASAKI K. ET AL.: "Mineralized tissue and vertebrate evolution: The secretory calcium-binding phosphoprotein gene cluster" P.N.A.S, vol. 100, no. 7, 1 April 2003 (2003-04-01), pages 4060-4065, XP002275668 the whole document	

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member(s)	Publication date
US 2003158115 A1	21-08-2003	US 6482934 B1	19-11-2002

RAPPORT DE RECHERCHE INTERNATIONALE

Demande internationale No
/FR2004/002797

A. CLASSEMENT DE L'OBJET DE LA DEMANDE
CIB 7 C07K14/47

Selon la classification internationale des brevets (CIB) ou à la fois selon la classification nationale et la CIB

B. DOMAINES SUR LESQUELS LA RECHERCHE A PORTE

Documentation minimale consultée (système de classification suivi des symboles de classement)
CIB 7 C07K

Documentation consultée autre que la documentation minimale dans la mesure où ces documents relèvent des domaines sur lesquels a porté la recherche

Base de données électronique consultée au cours de la recherche internationale (nom de la base de données, et si réalisable, termes de recherche utilisés)
EPO-Internal, Sequence Search, BIOSIS, EMBASE, PAJ, WPI Data

C. DOCUMENTS CONSIDERES COMME PERTINENTS

Catégorie °	Identification des documents cités, avec, le cas échéant, l'indication des passages pertinents	no. des revendications visées
X	US 2003/158115 A1 (LIESKE JOHN C ET AL) 21 août 2003 (2003-08-21) abrégé exemple 6 SEQ ID No 16	1-9
X	DATABASE UNIPROT 'Online! EBI; 10 octobre 2003 (2003-10-10), XP002275669 Database accession no. P35482 le document en entier	1-9

-/--

[X] Voir la suite du cadre C pour la fin de la liste des documents

[X] Les documents de familles de brevets sont indiqués en annexe

° Catégories spéciales de documents cités:

"A" document définissant l'état général de la technique, non considéré comme particulièrement pertinent

"E" document antérieur, mais publié à la date de dépôt international ou après cette date

"L" document pouvant jeter un doute sur une revendication de priorité ou cité pour déterminer la date de publication d'une autre citation ou pour une raison spéciale (telle qu'indiquée)

"O" document se référant à une divulgation orale, à un usage, à une exposition ou tous autres moyens

"P" document publié avant la date de dépôt international, mais postérieurement à la date de priorité revendiquée

"T" document ultérieur publié après la date de dépôt international ou la date de priorité et n'appartenenant pas à l'état de la technique pertinent, mais cité pour comprendre le principe ou la théorie constituant la base de l'invention

"X" document particulièrement pertinent; l'invention revendiquée ne peut être considérée comme nouvelle ou comme impliquant une activité inventive par rapport au document considéré isolément

"Y" document particulièrement pertinent; l'invention revendiquée ne peut être considérée comme impliquant une activité inventive lorsque le document est associé à un ou plusieurs autres documents de même nature, cette combinaison étant évidente pour une personne du métier

"&" document qui fait partie de la même famille de brevets

Date à laquelle la recherche internationale a été effectivement achevée	Date d'expédition du présent rapport de recherche internationale
23 mars 2005	01/04/2005

Nom et adresse postale de l'administration chargée de la recherche internationale	Fonctionnaire autorisé
Office Européen des Brevets, P.B. 5818 Patentlaan 2 NL – 2280 HV Rijswijk Tel. (+31-70) 340-2040, Tx. 31 651 epo nl, Fax: (+31-70) 340-3016	Keller, Y

3

RAPPORT DE RECHERCHE INTERNATIONALE

Demande Internationale No
../FR2004/002797

C.(suite) DOCUMENTS CONSIDERES COMME PERTINENTS

Catégorie °	Identification des documents cités, avec, le cas échéant, l'indication des passages pertinents	no. des revendications visées
A	KAWASAKI K. ET AL.: "Mineralized tissue and vertebrate evolution: The secretory calcium-binding phosphoprotein gene cluster" P.N.A.S, vol. 100, no. 7, 1 avril 2003 (2003-04-01), pages 4060-4065, XP002275668 le document en entier	

RAPPORT DE RECHERCHE INTERNATIONALE

Renseignements rel ux membres de familles de brevets

Demande internationale No

. . ./FR2004/002797

Document brevet cité au rapport de recherche	Date de publication	Membre(s) de la famille de brevet(s)	Date de publication
US 2003158115 A1	21-08-2003	US 6482934 B1	19-11-2002